

Simulations numériques de phénomènes MHD-thermiques avec interface libre dans l'électrolyse de l'aluminium

THÈSE N° 5738 (2013)

PRÉSENTÉE LE 14 JUIN 2013

À LA FACULTÉ DES SCIENCES DE BASE
CHAIRE D'ANALYSE ET DE SIMULATION NUMÉRIQUE
PROGRAMME DOCTORAL EN MATHÉMATIQUES

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES

PAR

Stéphane FLOTRON

acceptée sur proposition du jury:

Prof. J. Krieger, président du jury
Prof. J. Rappaz, Prof. M. Picasso, directeurs de thèse
Prof. F. Gallaire, rapporteur
Dr S. Langlois, rapporteur
Dr J.-F. Scheid, rapporteur



ÉCOLE POLYTECHNIQUE
FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Suisse
2013

Résumé

L'électrolyse de l'aluminium est un processus physique complexe, couplant l'électromagnétisme, la mécanique des fluides et la solidification. Ce procédé, dit de Hall-Héroult, est effectué dans ce qui est appelé une cuve d'électrolyse. En substance, le processus est le suivant : l'oxyde d'aluminium Al_2O_3 est injecté dans un solvant, appelé bain électrolytique ou électrolyte, se trouvant à une température d'environ $960^\circ C$. A cette température, autant le bain que l'aluminium sont liquides. Un fort courant électrique traverse le solvant, ce qui permet de réaliser l'électrolyse. L'aluminium liquide créé étant non miscible dans l'électrolyte, celui-ci se dépose au fond de la cuve. Cette immiscibilité des fluides entraîne l'existence d'une interface entre le bain électrolytique et l'aluminium. Le fort courant électrique traversant les fluides couplé au champ d'induction magnétique met ces derniers en mouvement, ce qui se traduit par des variations temporelles de l'interface aluminium-bain. Des effets thermiques entraînent une solidification du solvant sur le bord de la cuve. Ainsi, le procédé de Hall-Héroult contient deux surfaces libres variant avec le temps : l'interface aluminium-bain et le front de solidification.

L'objectif de cette thèse est de modéliser et simuler numériquement le processus d'électrolyse de l'aluminium au moyen d'un code éléments finis, avec la particularité de prendre en compte simultanément la frontière solide-liquide et l'interface aluminium-bain. Pour ce faire, nous utilisons une approche eulérienne afin de simuler l'écoulement des fluides ainsi que l'évolution temporelle de l'interface. Dans le cadre de ce travail, nous avons choisi de raffiner le maillage au voisinage de l'interface afin de gagner en précision. Cette méthode est validée sur un cas réaliste en la comparant avec l'approche lagrangienne utilisée jusqu'à présent.

Lors de la résolution numérique du problème thermique, nous avons constaté des pertes d'énergie avec la méthode de type éléments finis utilisée, ce qui conduit à une surestimation des zones solides stationnaires. Nous présentons une méthode permettant de résoudre cette difficulté. Après la présentation des différents schémas utilisés dans nos travaux, nous étudions l'influence de l'interface aluminium-bain sur les zones solides stationnaires, ainsi que l'influence des talus sur l'interface aluminium-bain stationnaire.

Mots clés Couplage MHDTE avec interface libre, simulations numériques, méthode des éléments finis, méthode eulérienne, méthode lagrangienne, level-set, conservation de l'énergie.

Abstract

Aluminium electrolysis is a complex physical problem, involving electromagnetism, fluid mechanic and solidification, which takes place in an electrolysis cell. This process, called Hall-Héroult process, can be described as follows : aluminium oxide Al_2O_3 is injected in a solvent, called bath or electrolyte, whose temperature is around $960^\circ C$. At this temperature, both the solvent and the aluminium are liquid. A strong electrical current goes through the bath, which allows the electrolysis reaction. Due to the fact that liquid aluminium does not mix with the solvent, the aluminium created by the electrolysis moves under the electrolyte, to the bottom of the cell. This results in the existence of an interface between the electrolytical bath and the liquid aluminium. The strong electrical current going through the cell impresses a movement to the fluids, which implies a displacement of the aluminium-bath interface. Due to thermal effects, there is a solidification of the solvent on the boundary of the cell. Hence, there are two time dependant free boundaries in the Hall-Héroult process : the solidification front and the aluminium-electrolyte interface.

The aim of the present work is to model and numerically simulate the Hall-Héroult process using a finite element code, with the particularity to take into account simultaneously the free boundaries mentioned before, namely the aluminium-bath interface and the solidification front. To do so, we use an Eulerian approach to simulate the fluid flow and the evolution of the bath-aluminium interface. In order to gain precision, we locally refine the mesh according to the interface position which is a major difference to classical eulerian methods. Comparing our results to those obtained by the Lagrangian approach used up to now corroborates our approach.

Solving the thermal problem numerically with our finite element method, some energy losses have been registered. These losses are problematic, because they lead to an over-estimation of the solidified domain. To avoid this we developed a numerical method that does not have this drawback. After the presentation of the numerical schemes used in this work, we study the influence of the aluminium-bath interface on the stationary solidified region as the impact of solid domain on the stationary interface.

Keywords : thermal and magnetohydrodynamic with free interface coupling, numerical simulations, finite element method, Eulerian method, Lagrangian method, level-set, energy conservation.

Remerciements

En premier lieu, je tiens à remercier le Professeur Jacques Rappaz, mon directeur de thèse, pour m'avoir accueilli dans sa chaire. A son contact, j'ai beaucoup appris sur le calcul scientifique, ainsi qu'à travailler de manière plus scientifique et autonome. Je remercie également mon codirecteur de thèse, le Professeur Marco Picasso, pour ses remarques constructives sur mon travail et les nombreuses discussions que nous avons eues, qu'elles aient été scientifiques ou non.

Je tiens également à remercier les membres de mon jury de thèse, les Professeurs François Gallaire et Jean-François Scheid, ainsi que Steve Langlois pour toutes leurs remarques constructives et les nombreuses heures passées à relire mon document. Je remercie également le Professeur Joachim Krieger, président du jury.

Un merci tout particulier est adressé à l'entreprise Rio-Tinto Alcan pour le financement de cette thèse, ainsi qu'aux membres du LRF de Saint-Jean-de-Maurienne pour l'excellente collaboration durant ces quatre ans.

Je tiens à remercier mes collègues de travail, Diane, Guillaume, Wissam, Nicolas, Pascal, Laurent et Viljami pour la bonne ambiance au sein du groupe. Je remercie également Alexandre Masserey et Alexandre Caboussat pour les nombreuses discussions fructueuses que nous avons eues. Un merci tout particulier est adressé à Gilles et Michel pour leur soutien informatique, car sans leurs remarques et leur aide, un tel travail n'aurait pas été possible. Je tiens encore à remercier Thomas, JC, Denis et Jonathan "Grochat" pour l'excellente ambiance de bureau.

Un grand merci à l'équipe tarot, *i.e.* Keuj, Lolette, Waaaaaat, Juju, JB, Laura et Maxime pour ces nombreuses pauses café où l'art du bétonnage n'était pas reconnu à sa juste valeur. Je tiens également à remercier Caroline, Maya, Simone et les membres de "l'apéro" pour l'organisation des nombreuses collations du vendredi permettant de décompresser après une semaine chargée. Je remercie également Gwenol et Samuel pour toutes les discussions ayant trait à l'analyse numérique et toutes les discussions non sérieuses qui suivirent. Je remercie tout particulièrement Nicolas pour la lecture attentive de mon manuscrit et les nombreuses fautes d'orthographe qu'il a corrigées.

Je remercie également les amis musiciens Valérie, Pascal, Denis, Marie, Loriane, Mélinda, Stéphane, FranCk, Robin, Basile, Hervé, l'équipe des sketchs et beaucoup d'autres pour les bons moments passés lors des répétitions, concerts, girones et cantonales et sans lesquels il n'aurait pas été possible de mener à bien mes études.

Je termine en adressant un immense merci à ma famille, qui m'a toujours soutenu lors de mes études, qui m'a aidé dans les moments difficiles et dont la porte est toujours ouverte et sans laquelle je n'aurais jamais pu avoir un tel succès dans mes études universitaires. Encore mille fois merci à vous !

Table des matières

1	Introduction	1
2	Modélisation	7
2.1	Hydrodynamique	7
2.2	Interface libre	11
2.3	Electromagnétisme	12
2.3.1	Equations de Maxwell	13
2.3.2	Potentiel et courant	13
2.3.3	Induction	14
2.4	Thermique	15
2.5	Couplages entre les problèmes	17
2.6	Conclusions	18
3	Méthodes eulériennes	21
3.1	Motivations	21
3.2	Survol des méthodes eulériennes	22
3.3	Adaptation locale du maillage	25
3.3.1	Algorithme de raffinement du maillage	28
3.4	Extensions du partage des tétraèdres	37
3.4.1	Découpe des anodes	37
3.4.2	Découpe des matériaux entourant les fluides	38
3.5	Conclusions	40
4	MHD sur maillage fixe	41
4.1	Notations utilisées	41
4.2	Potentiel et courant	43
4.3	Equations de Navier-Stokes	43
4.3.1	Modèle de viscosité turbulente	44
4.3.2	Projection des forces	45
4.4	Interface libre	46
4.4.1	Résolution de l'équation de transport	46
4.4.2	Lissage de l'interface	46
4.4.3	Traitement de l'interface dans les talus	48

4.4.4	Reconstruction de la distance signée	50
4.4.5	Conservation du volume	51
4.5	Interpolation	52
4.6	Algorithme évolutif sur maillage fixe	52
4.7	Conclusions	54
5	Conservation de l'énergie	55
5.1	Introduction	55
5.1.1	Discrétisation en espace et propriétés de conservation	57
5.1.2	Autres approximations du terme convectif	58
5.2	Discrétisation du schéma conservatif	60
5.3	Validation numérique	62
5.3.1	Schémas numériques et propriétés de conservation	62
5.3.2	Validation numérique	64
5.4	Conclusions	66
6	Résolution numérique du problème MHDTE	67
6.1	Introduction et notations utilisées	67
6.2	Schémas numériques	68
6.2.1	Potentiel et courant	69
6.2.2	Hydrodynamique	69
6.2.3	Température et enthalpie	70
6.2.4	Modèle de conductivité thermique turbulente	74
6.3	Résolution du problème MHDTE avec interface fixée	74
6.4	Adaptation locale du maillage au front de solidification	75
6.4.1	Raffinement de la triangulation	75
6.4.2	Calculs des talus stationnaires	76
6.5	Conclusions	77
7	Validation numérique	79
7.1	Validation de la MHD sur maillage fixe	80
7.1.1	Modes gravitationnels	80
7.1.2	Expérience de Coventry	85
7.1.3	Cuve numérique	96
7.1.4	Cuve industrielle simplifiée	101
7.1.5	Modes gravitationnels avec talus	105
7.2	Influence des talus sur l'interface	108
7.3	Influence de l'interface sur les talus	114
7.4	Raffinement du maillage au voisinage du front de solidification	116
7.4.1	Cuve numérique thermique	117
7.4.2	Cuve industrielle simplifiée	122
7.5	Conclusions	126
8	Conclusions	127

Chapitre 1

Introduction

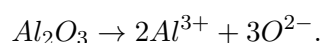
L'aluminium est l'un des éléments chimiques les plus présents sur Terre, après l'oxygène et le silicone. En effet, environ 8% de la croûte terrestre est composée d'aluminium. Ce dernier étant très réactif, il n'est pas présent sous forme pure, mais se trouve dans différents oxydes, comme par exemple l'alumine (Al_2O_3). Pas moins de 270 minéraux différents contiennent des oxydes d'aluminium, mais ceux-ci sont particulièrement présents dans la bauxite [25].

Cela explique pourquoi nous ne trouvons aucune trace de l'aluminium avant 1825, année de son isolement par H.C. Ørsted. Deux ans plus tard, F. Wöhler découvre une méthode de réduction de l'aluminium à l'aide du potassium. Ce procédé, bien qu'amélioré en 1846 par Henri Deville en remplaçant le potassium par du sodium, ne permettait pas d'obtenir une production industrielle, car il était trop coûteux. Il fallut attendre la fin du XIX^{ème} siècle pour que la production d'aluminium devienne industrielle.

Cette production industrielle fut rendue possible par les travaux du chimiste autrichien K. Bayer. En effet, c'est grâce à son procédé d'extraction d'alumine à partir de la bauxite que Paul Héroult et Charles Hall vont découvrir, de manière indépendante et simultanée, la production d'aluminium par électrolyse. Ce procédé, dit de *Hall-Héroult*, est celui utilisé actuellement pour la production d'aluminium et n'a guère changé en un peu plus de 110 ans.

Electrolyse de l'aluminium

L'électrolyse est une méthode permettant de modifier des liaisons chimiques au moyen d'un courant électrique continu. Par exemple, l'électrolyse permet de décomposer l'eau (H_2O) en hydrogène (H_2) et en oxygène (O_2), ou le sel de cuisine ($NaCl$) en chlore (Cl_2) et en sodium (Na). Dans notre cas, l'alumine (Al_2O_3) est injectée dans un électrolyte de sels fondus, appelé *bain*, qui est une solution fortement corrosive composée principalement de cryolithe (Na_2AlF_6) et de différents composants chimiques destinés à abaisser le point de fusion du bain à environ $960^\circ C$. Le bain étant liquide, les molécules d'alumine se dissolvent et interagissent avec ce dernier pour s'ioniser de la manière suivante :



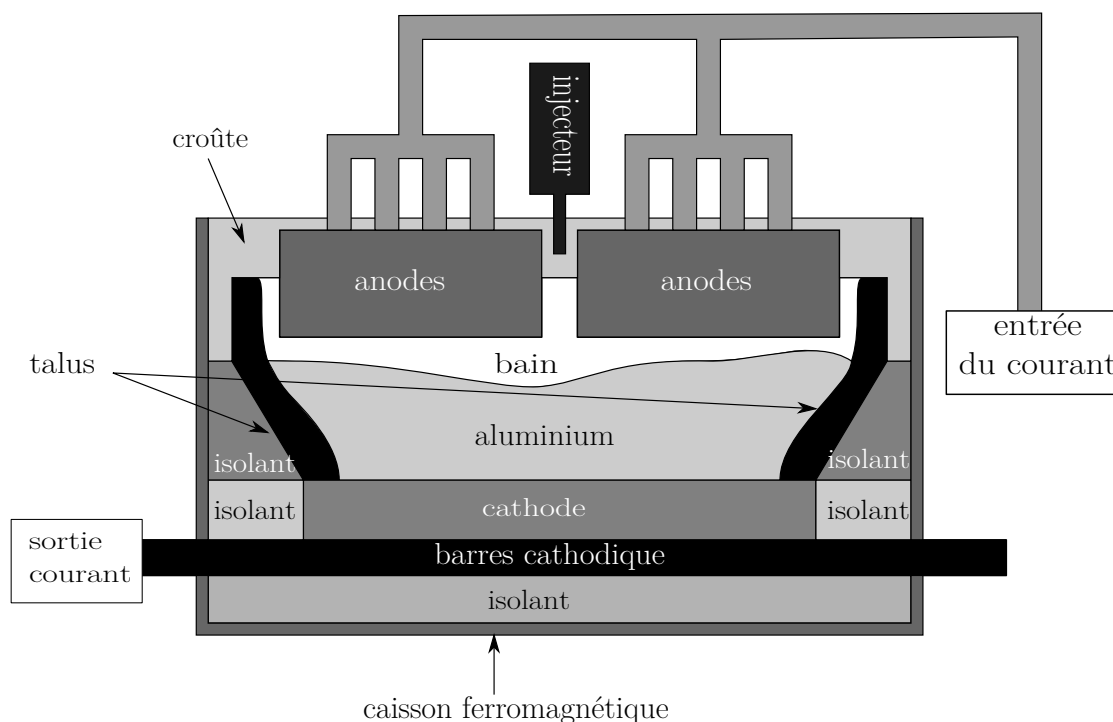
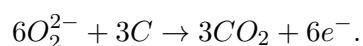
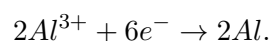


FIGURE 1.1 – Cuve d'électrolyse d'aluminium, vue schématique.

Le fort courant passant des anodes en carbone partiellement immergées dans le bain aux blocs cathodiques en carbone situés sous l'aluminium liquide (voir FIGURE 1.1) permet aux ions d'oxygène de réagir avec les anodes en carbone pour former du gaz carbonique selon la réaction



Cette réaction chimique avec les anodes conduit à une production importante de gaz carbonique et consomme progressivement les blocs de carbone composant les anodes, ce qui entraîne un remplacement fréquent de ceux-ci. Les ions d'aluminium sont ensuite transformés en aluminium liquide par la réaction de réduction



Cette électrolyse étant effectuée à une température proche de $960^\circ C$, autant l'aluminium que le bain électrolytique sont liquides. De plus, l'aluminium et le bain étant immiscibles, ces deux fluides se séparent, et l'aluminium, plus dense, se dépose au fond de la cuve, d'où il peut être récupéré par pompage.

L'électrolyte étant un piètre conducteur électrique, le fort courant traversant celui-ci dégage une grande quantité de chaleur par effet Joule du courant. Cette production de chaleur est telle qu'elle permet de maintenir l'aluminium et le bain à l'état liquide durant toute la durée



FIGURE 1.2 – Hall d'électrolyse.

d'exploitation de la cuve. Un hall d'électrolyse moderne peut contenir plusieurs centaines de cuves, disposées en série, comme illustré dans la FIGURE 1.2.

Les courants électriques traversant les cuves engendrent un fort champ d'induction magnétique. Celui-ci interagit avec le courant pour créer des forces de Lorentz qui mettent en mouvement les fluides. Ce mouvement des fluides permet de répartir l'alumine dans le bain, de faciliter sa dissolution et d'homogénéiser la température dans la cuve. Néanmoins, si le mouvement des fluides est trop important, l'interface aluminium-bain peut se déformer de manière importante et toucher les anodes, ce qui provoque un court-circuit obligeant l'arrêt de la cuve d'électrolyse.

Electrolyse et zones solides

La température du bain étant proche de celle de son point de fusion, à cause d'effets thermiques, l'électrolyte se solidifie sur le bord du domaine occupé par les fluides. Ces zones solidifiées, appelées "talus", sont importantes car elles protègent la structure métallique de la cuve de l'extrême corrosivité du bain électrolytique. Une stratégie pour augmenter la production d'aluminium consiste à créer des cuves fonctionnant avec des courants de plus en plus intenses, de l'ordre de plusieurs centaines de milliers d'ampères. L'augmentation de l'intensité du courant traversant la cuve a pour conséquence que l'énergie dissipée par effet Joule du courant croît, ce qui se traduirait par une fonte des talus et une usure précoce des cuves si un nouveau design des cuves garantissant cette protection n'était élaboré. De plus, si

Time = 1000.0

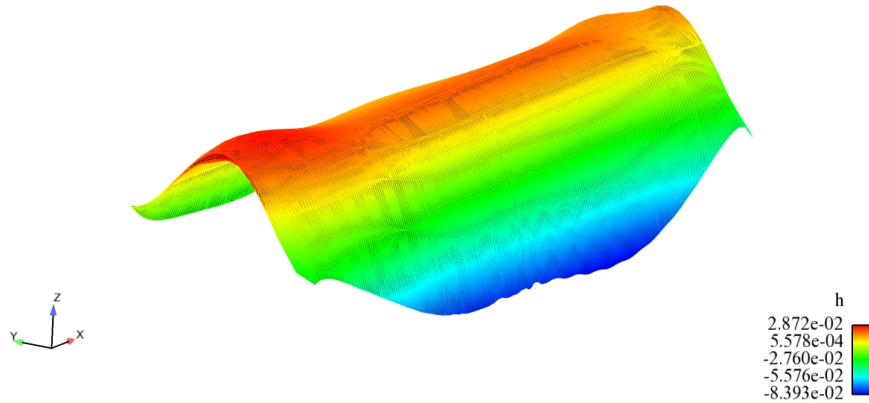


FIGURE 1.3 – Interface aluminium-bain stationnaire.

cette fonte est trop importante, les talus disparaissent et la structure de la cuve est attaquée par le bain électrolytique.

Les coûts liés à la consommation du courant électrique étant élevés, un des objectifs pour diminuer les frais de production consiste à restreindre les pertes d'énergie par effet Joule. Or, une réduction de l'effet Joule entraîne une croissance des talus. Si cette augmentation des zones solides n'est pas maîtrisée, celle-ci peut provoquer des dégâts sur la structure. Il est donc nécessaire d'avoir une bonne connaissance de la réaction des talus aux variations de l'effet Joule afin de maintenir une cuve en bon état durant toute sa durée d'exploitation.

Simulation numérique

Il est difficile d'étudier les talus dans une cuve d'électrolyse en fonction. En effet, la haute température des fluides, la corrosivité du bain et l'intensité du courant traversant la cuve rendent les mesures à l'intérieur de la cuve difficiles à réaliser fréquemment. Le recours à la simulation numérique devient indispensable pour améliorer la conception et la construction de cuves en respectant un bon équilibre thermique. Dans le cadre de la collaboration entre le LRF et l'EPFL, les premiers travaux effectués en ce sens furent ceux de Y. Safa en 2005 [48], mais qui, pour des raisons de simplification du problème, a toujours pris une interface aluminium bain horizontale, ce qui ne correspond pas à la réalité, l'interface aluminium bain étant bombée (voir FIGURE 1.3). Notons que dans la FIGURE 1.3, l'échelle de la déformation est en mètres et que nous avons accentué la déformation verticale de l'interface afin d'avoir une meilleure vision.

Mentionnons encore que les calculs d'interfaces aluminium-bain stationnaires ou transitoires effectués jusqu'à ce jour ne tiennent pas compte des talus. Cela est dû au fait que l'interface reste figée dans les zones solides, ce qui a de lourdes conséquences pour les calculs

numériques (ce point est discuté plus en détail dans le chapitre 3). Le but de cette thèse est de développer une méthode eulérienne de type transitoire afin de calculer des interfaces stationnaires lorsqu'il y a présence de talus. A l'aide de cette méthode, il sera dès lors possible de mesurer l'influence de l'interface aluminium-bain sur la solution thermique stationnaire, ainsi que l'influence des talus sur l'interface stationnaire. Nous pourrions ainsi apporter des réponses sur la pertinence de l'utilisation d'une interface aluminium-bain horizontale pour les calculs de talus stationnaires, ainsi que sur le bien-fondé de l'omission des talus pour le calcul de l'interface stationnaire.

La présente thèse s'inscrit dans une longue collaboration entre la Chaire ASN du Professeur Jacques Rappaz, l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne et l'industrie de l'aluminium, dans le but de simuler différents aspects du processus de Hall-Héroult. Cette collaboration débuta dans les années 1980 avec la création d'un programme, appelé *ALUCCELL*, permettant de calculer des états stationnaires de cuves. Au fil des années, le logiciel s'est étoffé avec des modules permettant (i) une étude de la stabilité linéaire des solutions stationnaires [16, 17], (ii) le calcul des effets ferromagnétiques dans le caisson entourant la cuve [19], (iii) de déterminer les régions de bain solidifiées et leur influence sur l'hydrodynamique [48], (iv) une approche dite "évolutive" pour simuler de manière instationnaire le mouvement des fluides [41, 51] et plus récemment, (v) une étude de la répartition de la concentration d'alumine dans le bain [28].

Organisation du document

Ce document a pour objectif de présenter une méthode eulérienne de type transitoire permettant de résoudre le problème MHD-thermo-électrique avec interface libre présent dans le procédé de Hall-Héroult.

Au chapitre 2, nous présentons les équations régissant le procédé de Hall-Héroult, ainsi que les interactions entre les différents aspects du problème et les difficultés numériques associées. Dans les chapitres 3 à 6, nous présentons les schémas numériques utilisés dans le cadre de ce travail. Un accent particulier est mis sur les méthodes eulériennes (chap. 3) et sur la conservation numérique de l'énergie (chap. 5). Nous présentons également une approche permettant de gagner en précision sur le front de solidification (chap. 6).

Le chapitre 7 présente la validation numérique de l'algorithme eulérien de type transitoire développé au chapitre 4, ainsi que la validation de la méthode permettant de gagner en précision sur le front de solidification. Nous y étudions également l'influence de l'interface aluminium-bain sur les talus stationnaires ainsi que l'impact des talus sur l'interface stationnaire.

Chapitre 2

Modélisation

Ce chapitre a pour objectif de présenter les équations modélisant les phénomènes magnéto-hydrodynamiques (abrégé MHD) et thermiques apparaissant lors de l'électrolyse de l'aluminium. Le modèle utilisé dans ce document est basé sur ceux développés dans [48, 51].

2.1 Hydrodynamique

Soit Λ le domaine borné de \mathbb{R}^3 défini par la cuve d'électrolyse (aluminium, bain, anodes, barres cathodiques, isolants, griffes, etc.) et soit $\Omega \subset \Lambda$ le domaine composé de la région $\Omega_{al}(t)$ occupée par l'aluminium liquide, de l'espace $\Omega_{el}(t)$ occupé par le bain électrolytique et du domaine solide $\Omega_s(t)$ (les talus), où t représente le temps. Clairement, nous avons $\Omega = \text{int} \left(\overline{\Omega}_{al}(t) \cup \overline{\Omega}_{el}(t) \cup \overline{\Omega}_s(t) \right)$ pour tout t , comme montré dans la FIGURE 2.1. L'interface $\hat{\Gamma}(t)$ entre les fluides est alors définie par $\hat{\Gamma}(t) = \overline{\Omega}_{al}(t) \cap \overline{\Omega}_{el}(t), \forall t > 0$. Nous faisons l'hypothèse qu'un prolongement continu $\Gamma(t)$ de $\hat{\Gamma}(t)$ est connu pour tout t , c'est-à-dire $\hat{\Gamma}(t) \subset \Gamma(t) \subset \Omega$. Nous supposons de plus que $\Gamma(t)$ est le graphe d'une fonction lisse $g(t, x, y)$, autrement dit qu'il existe un domaine $\Pi \subset \mathbb{R}^2$ tel que

$$\Gamma(t) = \{(x, y, z) \in \Omega : z = g(t, x, y), (x, y) \in \Pi, t \in (0, \infty)\}. \quad (2.1)$$

Nous noterons la densité de l'aluminium et du bain ρ_{al} et ρ_{el} respectivement. De même, la viscosité dynamique de l'aluminium et de l'électrolyte seront notées μ_{al} et μ_{el} respectivement. Afin d'alléger l'écriture, la densité et la viscosité seront notées ρ et μ lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté.

Dans la suite de ce paragraphe, nous faisons l'hypothèse que les domaines Ω_{el}, Ω_{al} et Ω_s sont connus pour tout t . Nous supposons également que les valeurs de la densité de courant \vec{j} , du champ d'induction \vec{B} et de la température T sont déterminées en tout point de Λ et pour tout t . Sous ces hypothèses, nous pouvons dès lors décrire le modèle permettant de déterminer la vitesse $\vec{u} : (0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$.

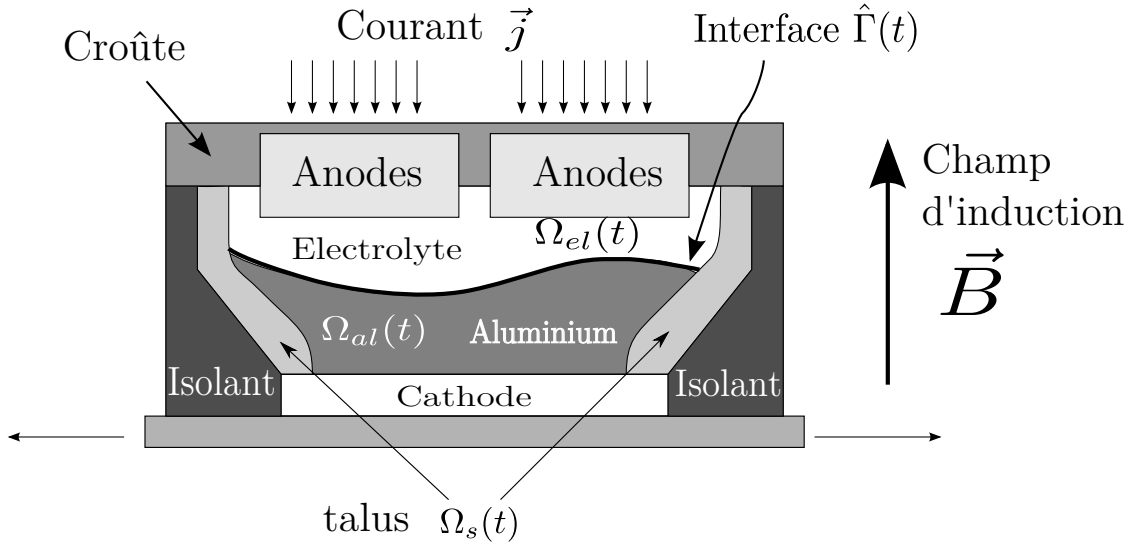


FIGURE 2.1 – Domaines et notations

Pénalisation de Carman-Kozeny

Le champ de vitesse \vec{u} est uniquement défini dans le domaine liquide $\Omega_{liq} = \Omega \setminus \Omega_s$ qui varie au cours du temps. Cette variation temporelle du domaine Ω_{liq} est source de nombreuses difficultés, autant numériques que théoriques. Numériquement parlant, il est nécessaire de connaître le domaine fluide Ω_{liq} afin de déterminer l'écoulement des fluides dans ce dernier.

Une approche pour déterminer Ω_{liq} est le *front tracking*, qui consiste à suivre explicitement le front de solidification au cours du temps (voir [30, 14] pour une introduction à cette technique). Cela a pour avantage que le domaine Ω_s est connu de manière précise pour tout temps t (et donc le domaine liquide Ω_{liq}). Néanmoins, le *front tracking* supporte mal les changements de topologie du domaine solide, tels que la séparation d'une zone solide en deux ou la rencontre de deux zones solides distinctes. Des solutions au problème du changement de topologie existent, mais celles-ci sont difficiles à réaliser en trois dimensions. Ce procédé est bien adapté dans les cas où les variations de la frontière solide-liquide sont faibles. Dans notre cas, la condition initiale étant souvent un domaine entièrement liquide, cette méthode est difficile à mettre en œuvre.

Une autre méthode fréquemment utilisée pour connaître Ω_{liq} consiste à faire du maillage adaptatif pour suivre avec précision le front de solidification. Avec cette approche, le domaine liquide est connu avec précision en tout temps t , mais ce procédé nécessite de remailler fréquemment la cuve d'électrolyse, ce qui est trop coûteux en temps de calcul.

Au vu des difficultés liées à la connaissance explicite du domaine Ω_{liq} , nous utilisons la méthode dite du *domaine fictif* afin de calculer le champ de vitesse \vec{u} . Cette approche consiste

à plonger le domaine de calcul Ω_{liq} dans un domaine fixe Ω et de calculer \vec{u} sur Ω via une méthode de pénalisation forçant la vitesse à être nulle dans Ω_s . Pour ce faire, il est nécessaire d'introduire la *fraction liquide*, notée f_l .

En notant T_s et T_l les températures à partir desquelles une substance est respectivement totalement solide ou totalement liquide, cette fonction $f_l : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ est définie par

$$f_l(T) = \begin{cases} 1 & \text{si } T \geq T_l \\ 0 & \text{si } T \leq T_s \\ \in]0, 1[& \text{si } T_s < T < T_l \end{cases}$$

Dans la pratique, les valeurs de f_l en fonction de T sont obtenues de manière expérimentale. Notons encore qu'entre T_s et T_l nous avons la présence d'une *mushy zone*, c'est-à-dire l'existence d'un état thermodynamique où les phases solides et liquides coexistent. Dans la suite de ce travail, nous supposons que cette relation entre f_l et T est connue pour tout T .

A l'aide de la fraction liquide, nous choisissons de définir le domaine solide par

$$\Omega_s = \{\vec{x} \in \Omega : f_l(T(\vec{x})) \leq 0.5\}.$$

Nous faisons l'hypothèse supplémentaire que les fluides sont newtoniens, visqueux et incompressibles. En conséquence, l'écoulement des fluides est modélisé par les équations de Navier-Stokes incompressibles. Les forces agissant sur les fluides étant la gravité et des forces de Lorentz, la résultante des forces est donnée par $\rho\vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$. Ainsi, la vitesse \vec{u} et la pression p des fluides satisfont les équations de Navier-Stokes incompressibles pénalisées suivantes

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \text{div}(\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)) + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + K_\varepsilon \vec{u} &= \rho\vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B} \\ \text{div } \vec{u} &= 0 \end{cases} \quad \text{dans } (0, \infty) \times \Omega \quad (2.2)$$

où $\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)$ est le tenseur des contraintes défini par

$$\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p) = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) - p\mathbb{I}, \quad (2.3)$$

où \mathbb{I} est la matrice identité de dimension 3 et $\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u})$ est le tenseur de déformation défini par

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{u}) = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \vec{u} + (\vec{\nabla} \vec{u})^T \right). \quad (2.4)$$

Le terme K_ε , dit de Carman-Kozeny, est quant à lui défini par

$$K_\varepsilon = \frac{C\mu(1 - f_l)^2}{P^2(f_l + \varepsilon)^3}. \quad (2.5)$$

Dans (2.5), μ représente la viscosité du fluide, P la taille moyenne de la porosité, C est une constante obtenue expérimentalement et $\varepsilon > 0$ est un paramètre. Notons que si $f_l = 1$, $K_\varepsilon = 0$ et si $f_l = 0$, $K_\varepsilon = \mathcal{O}(\varepsilon^{-3})$ lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. Ainsi, si $f_l = 0$ et si ε est suffisamment petit, $K_\varepsilon \vec{u}$ domine tous les autres termes et force la vitesse \vec{u} à être nulle dans le domaine solide Ω_s , y compris sur le bord de l'interface solide-liquide. Si $f_l = 1$, le terme de pénalisation disparaît et les équations de Navier-Stokes demeurent inchangées dans $\Omega_{liq} = \Omega \setminus \Omega_s$.

Nous complétons le problème (2.2) en imposant la continuité de la vitesse au travers de l'interface Γ , c'est-à-dire

$$[\vec{u}] = \vec{0} \quad (2.6)$$

où $[\cdot]$ est l'opérateur de saut au travers de l'interface. Nous supposons de plus que le saut des forces au travers de l'interface est nul, c'est-à-dire

$$[\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)\vec{n}_\Gamma] = \vec{0} \quad (2.7)$$

où $\vec{n}_\Gamma : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3$ est la normale unitaire sur Γ . La condition (2.7) revient à dire que les effets de tension de surface sont négligés. Ce choix est basé sur les travaux de G. Steiner qui montrent numériquement que la tension superficielle ne change que légèrement la solution stationnaire du problème MHD évolutif (voir [51] pour plus de détails), la distance capillaire étant bien plus petite que la longueur d'une cuve d'électrolyse.

Notons encore que la viscosité μ peut dépendre du tenseur ε lorsqu'un modèle de longueur de mélange est utilisé pour simuler la turbulence de l'écoulement. Cela ajoute une non-linéarité au problème hydrodynamique dont nous devons tenir compte lors de sa résolution numérique. Nous reviendrons sur ce point dans les chapitres 4 et 6.

Nous complétons le problème (2.2) par une condition initiale \vec{u}_0 sur la vitesse, \vec{u}_0 étant telle que

$$\vec{u}(0) = \vec{u}_0 \quad \text{et} \quad \text{div } \vec{u}_0 = 0, \quad (2.8)$$

ainsi que par des conditions aux limites sur le bord du domaine Ω , noté $\partial\Omega$. Dans le cadre de ce travail, nous utilisons des conditions d'adhérence

$$\vec{u} = \vec{0} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega, \quad (2.9)$$

ainsi qu'un modèle de friction proposé dans [45],

$$\vec{u} \cdot \vec{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{et} \quad (\boldsymbol{\tau}(\vec{u}, p)\vec{n}_{\partial\Omega}) \vec{t}_i = \alpha_f (\vec{u} \cdot \vec{t}_i), \quad i = 1, 2 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega, \quad (2.10)$$

où $\vec{n}_{\partial\Omega}$ est la normale unitaire extérieure à Ω , \vec{t}_1, \vec{t}_2 les deux vecteurs directeurs du plan tangent à $\partial\Omega$ et $\alpha_f \geq 0$ un paramètre numérique. Notons que si $\alpha_f = 0$, (2.10) correspond à des conditions de glissement, et que si le paramètre α_f tend vers l'infini, (2.10) tend vers des conditions d'adhérence sur le bord $\partial\Omega$.

Formulation faible

Considérons maintenant l'espace $L_0^2(\Omega)$ des fonctions mesurables au sens de Lebesgue, de carrés intégrables et à moyenne nulle défini par

$$L_0^2(\Omega) = \left\{ q \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} q dx = 0 \right\}.$$

En notant $H^1(\Omega)$ l'espace de Sobolev usuel, $\hat{H}(\Omega) = \{\vec{v} \in (H^1(\Omega))^3 : \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$ et

$$\varepsilon(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v}) = \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{ij}(\vec{u}) \varepsilon_{ij}(\vec{v}),$$

la forme variationnelle (ou forme faible) de l'équation (2.2) avec les conditions limites (2.10) est : pour presque tout $t \in (0, \infty)$: trouver $\vec{u}(t) \in \hat{H}(\Omega)$ et $p(t) \in L_0^2(\Omega)$ telles que

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \vec{u}(t) \cdot \vec{v} dx + \int_{\Omega} (2\mu \varepsilon(\vec{u}(t)) : \varepsilon(\vec{v}) + \rho(\vec{u}(t) \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}(t) \cdot \vec{v} - p(t) \operatorname{div} \vec{v} + K_\varepsilon \vec{u}(t) \cdot \vec{v}) dx \\ \quad + \alpha_f \int_{\partial\Omega} [(\vec{u}(t) \cdot \vec{t}_1)(\vec{v} \cdot \vec{t}_1) + (\vec{u}(t) \cdot \vec{t}_2)(\vec{v} \cdot \vec{t}_2)] ds = \int_{\Omega} (\rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{v} dx \\ \int_{\Omega} q \operatorname{div} \vec{u}(t) dx = 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

pour tout $\vec{v} \in \hat{H}(\Omega)$ et tout $q \in L_0^2(\Omega)$. Dans le cas des conditions aux limites d'adhérence (2.9), la formulation faible du problème (2.2) est pour presque tout $t \in (0, \infty)$: trouver $\vec{u}(t) \in (H_0^1(\Omega))^3$ et $p(t) \in L_0^2(\Omega)$ telles que

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \vec{u}(t) \cdot \vec{v} dx + \int_{\Omega} (2\mu \varepsilon(\vec{u}(t)) : \varepsilon(\vec{v}) + \rho(\vec{u}(t) \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}(t) \cdot \vec{v} - p(t) \operatorname{div} \vec{v} + K_\varepsilon \vec{u}(t) \cdot \vec{v}) dx \\ \quad = \int_{\Omega} (\rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{v} dx \\ \int_{\Omega} q \operatorname{div} \vec{u}(t) dx = 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

pour tout $\vec{v} \in (H_0^1(\Omega))^3$ et tout $q \in L_0^2(\Omega)$. Afin d'alléger l'écriture, tous les schémas numériques concernant les équations de Navier-Stokes seront développés pour la formulation (2.12), bien que les conditions de bord (2.9) et (2.10) soient utilisées dans nos simulations.

2.2 Interface libre

Dans cette section, nous supposons que le domaine Ω_s et le champ de vitesse \vec{u} sont connus pour tout $t > 0$. La résolution du problème (2.12) nécessite de connaître les domaines $\Omega_{al}(t)$ et $\Omega_{el}(t)$ pour tout temps t , et donc l'interface $\hat{\Gamma}(t)$ pour tout t . Pour ce faire, nous utilisons la méthode dite du *level-set*, introduite par S. Osher et J. Sethian en 1988 [39] et développée dans [40, 50]. L'idée de cette méthode est de repérer l'interface à l'aide d'une fonction continue $\hat{\varphi} : (0, \infty) \times \Omega_{liq} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\hat{\varphi}(t, \vec{x}) = \begin{cases} > 0 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_{el}(t), \\ < 0 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_{al}(t), \\ = 0 & \text{si } \vec{x} \in \hat{\Gamma}(t). \end{cases} \quad (2.13)$$

La relation (2.13) a comme conséquence notable que si la fonction level-set $\hat{\varphi}$ est connue, l'interface $\hat{\Gamma}(t)$ est définie de manière univoque par le domaine $\{(x, y, z) \in \Omega_{liq}(t) : \hat{\varphi}(t, x, y, z) = 0\}$. Afin de gagner en précision lors des calculs numériques de l'interface, $\hat{\varphi}$ est généralement prise comme distance signée à l'interface (voir section 4.4.4 pour plus d'explications sur ce choix).

L'interface étant définie uniquement dans le domaine liquide qui n'est pas connu de manière explicite, ceci est source de difficultés tant théoriques que numériques. L'approche choisie dans ce travail consiste à prolonger continûment l'interface $\hat{\Gamma}(t)$ du domaine Ω_{liq} au domaine Ω pour tout t . Soient Γ_0 et $\Gamma(t)$ les interfaces prolongées à $t = 0$ et au temps $t > 0$ respectivement, ainsi que φ_0 et $\varphi(t)$ les fonctions level-set associées. L'évolution temporelle de $\varphi : (0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est alors régie par l'équation suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = 0 & \text{dans } (0, \infty) \times \Omega, \\ \varphi(0, \vec{x}) = \varphi_0(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \Omega. \end{cases} \quad (2.14)$$

La vitesse étant nulle dans Ω_s , l'interface $\Gamma(t)$ reste figée dans les talus (c'est à dire que $\varphi(t) \equiv \varphi_0$ dans Ω_s) et se déplace dans les fluides. La pénalisation de Carman-Kozeny imposant des conditions d'adhérence sur le bord des talus, l'interface ne se déplace pas le long de ceux-ci lors de l'évolution temporelle. Cette propriété implique la continuité de l'interface $\Gamma(t)$ pour tout temps t .

Néanmoins, nous préférons que l'interface glisse le long des talus. Ne pouvant pas imposer des conditions de glissement sur le bord des talus lors des calculs numériques, nous déplaçons artificiellement l'interface le long de la frontière solide liquide. Cette approche peut entraîner une discontinuité de $\Gamma(t)$ au niveau du front de solidification si la position de l'interface dans les talus n'est pas fréquemment actualisée. Nous proposons des solutions à ces problèmes dans le chapitre 4.

En principe, la condition initiale φ_0 du problème (2.14) est la fonction level-set correspondant à une interface aluminium-bain horizontale. Plus précisément,

$$\varphi_0(\vec{x}) = z - z_0 \quad \forall \vec{x} \in \Omega, \quad (2.15)$$

où z_0 correspond à la position d'équilibre de l'interface aluminium-bain lorsque les forces électromagnétiques sont négligées.

2.3 Electromagnétisme

Afin de simuler l'écoulement des fluides, il est nécessaire de connaître les forces agissant sur les fluides pour tout temps t , en particulier les forces de Lorentz $\vec{j} \wedge \vec{B}$. Le but de cette section est de déterminer les équations permettant de calculer la densité de courant \vec{j} et le champ d'induction \vec{B} intervenant dans les forces de Lorentz. Pour ce faire, nous supposons connus le champ de vitesse \vec{u} , l'interface Γ , et les domaines Ω_{al} , Ω_{el} et Ω_s pour tout $t > 0$.

Nous considérons la cuve d'électrolyse dans sa totalité et la notons Λ . Le domaine Λ contient le bain, l'aluminium, les talus, les anodes, les barres cathodiques, les conducteurs électriques, les isolants thermiques, etc., comme illustré dans la FIGURE 2.1. Nous supposons également que le courant électrique entre par une surface $\Gamma_{in} \subset \partial\Lambda$ localisée sur les anodes,

traverse les fluides des anodes à la cathode et sort par une surface $\Gamma_{out} \subset \partial\Lambda$ localisée sur les barres cathodiques, avec $\Gamma_{in} \cap \Gamma_{out} = \emptyset$.

2.3.1 Equations de Maxwell

Les équations de Maxwell sont les expressions mathématiques liant le champ d'induction \vec{B} , la densité de courant \vec{j} et le champ électrique \vec{E} . La première de ces équations, appelée loi d'induction de Faraday, lie la variation temporelle du champ d'induction à la circulation du champ électrique \vec{E} par la relation

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \text{rot } \vec{E} = \vec{0}. \quad (2.16)$$

La deuxième loi de Maxwell, appelée loi d'Ampère, lie la densité de courant \vec{j} , les courants de déplacement $\frac{\partial(\varepsilon \vec{E})}{\partial t}$ et le champ magnétique $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} \vec{B}$ par la relation

$$\text{rot } \vec{H} = \frac{\partial(\varepsilon \vec{E})}{\partial t} + \vec{j}, \quad (2.17)$$

où μ_0 est la perméabilité magnétique du vide, μ_r est la perméabilité relative des matériaux et ε est la permittivité électrique. Si les courants de déplacement sont négligés (voir [36] pour une justification), tout comme les effets ferromagnétiques (i.e. $\mu_r = 1$), la loi d'Ampère devient

$$\text{rot } \vec{B} = \mu_0 \vec{j}. \quad (2.18)$$

Nous complétons ces relations par la loi d'Ohm qui lie la densité de courant \vec{j} , le champ d'induction \vec{B} , le champ de vitesse \vec{u} et le champ électrique \vec{E} de la manière suivante

$$\vec{j} = \sigma \left(\vec{E} + \vec{u} \wedge \vec{B} \right), \quad (2.19)$$

où σ est la conductivité électrique des matériaux. Notons que (2.18) implique l'équation de continuité suivante :

$$\text{div } \vec{j} = 0. \quad (2.20)$$

Il a été montré numériquement dans [51] que les dérivées temporelles apparaissant dans la loi de Faraday (2.16) ne changent pas significativement la solution stationnaire du problème MHD avec interface libre. En conséquence, nous faisons l'hypothèse que les variations temporelles du champ d'induction \vec{B} dans (2.16) sont faibles et peuvent être négligées. Ainsi, (2.16) devient

$$\text{rot } \vec{E} = \vec{0}. \quad (2.21)$$

2.3.2 Potentiel et courant

Dans ce paragraphe, nous faisons l'hypothèse supplémentaire que le champ d'induction \vec{B} est connu pour tout t . Le rotationnel du champ électrique \vec{E} étant nul par la loi de Faraday, il existe un champ scalaire V tel que

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} V. \quad (2.22)$$

En insérant ceci dans la loi d'Ohm (2.19), celle-ci devient

$$\vec{j} = \sigma \left(-\vec{\nabla}V + \vec{u} \wedge \vec{B} \right). \quad (2.23)$$

De plus, comme $\text{div} \vec{j} = 0$ par la loi d'ampère (2.18), nous obtenons

$$-\text{div}(\sigma \vec{\nabla}V) = -\text{div}(\sigma \vec{u} \wedge \vec{B}). \quad (2.24)$$

L'équation (2.24) étant elliptique, celle-ci peut être résolue en imposant des conditions sur le bord du domaine Λ . Ces conditions sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \vec{j} \cdot \vec{n} &= -\mathcal{I}/|\Gamma_{in}| = -\sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} \quad \text{sur } \Gamma_{in}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} &= \mathcal{I}/|\Gamma_{out}| = -\sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} \quad \text{sur } \Gamma_{out}, \\ \vec{j} \cdot \vec{n} &= 0 = \sigma \frac{\partial V}{\partial \vec{n}} \quad \text{sur } \partial\Lambda \setminus (\Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}), \end{aligned} \quad (2.25)$$

où Γ_{in} , Γ_{out} sont respectivement les surfaces d'entrée et de sortie du courant, \vec{n} la normale extérieure à $\partial\Lambda$, \mathcal{I} le courant électrique total et $|\Gamma_{in}|$, $|\Gamma_{out}|$ les aires des surfaces d'entrée et de sortie du courant. Notons que la troisième condition correspond à un flux de courant nul sur le reste du bord de la cuve.

Formulation faible

Le potentiel V étant défini à une constante près, il est nécessaire de chercher ce dernier dans $H^1(\Lambda)/\mathbb{R}$ pour que le problème soit bien posé. La forme faible du problème (2.24) est alors : Trouver $V \in H^1(\Lambda)/\mathbb{R}$ tel que

$$\int_{\Lambda} \sigma \vec{\nabla}V \cdot \vec{\nabla}W dx = \int_{\Lambda} \sigma \left(\vec{u} \wedge \vec{B} \right) \cdot \vec{\nabla}W dx + \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{in}|} \int_{\Gamma_{in}} W ds - \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{out}|} \int_{\Gamma_{out}} W ds \quad (2.26)$$

pour tout $W \in H^1(\Lambda)/\mathbb{R}$. Dès que le potentiel V est connu, la densité de courant \vec{j} s'obtient directement de (2.23).

2.3.3 Induction

En principe, le champ d'induction \vec{B} engendré par une cuve d'électrolyse est la superposition du champ d'induction \vec{B}_{hor} correspondant à une interface aluminium-bain horizontale et d'une perturbation magnétique $\delta\vec{B}$ engendrée par les mouvements de l'interface aluminium-bain. Ceci a pour conséquence que \vec{B} varie au cours du temps, même si l'on ne considère pas le processus de solidification. Cependant, comme nous désirons obtenir une solution stationnaire avec un code transitoire, dans un premier temps, nous considérons le champ d'induction \vec{B} constant. Ainsi, nous prenons $\vec{B} = \vec{B}_{hor}$, où \vec{B}_{hor} est le champ d'induction correspondant à une interface aluminium-bain horizontale (voir [51] pour une justification).

Du fait de ces simplifications, il suffit de connaître la densité de courant stationnaire \vec{j}_{hor} correspondant à une interface aluminium-bain horizontale pour décrire les équations modélisant l'induction. En l'absence d'effet ferromagnétiques, la formule de Biot-Savart nous permet de trouver le champ d'induction \vec{B}_{hor} par la relation

$$\vec{B}_{hor}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \vec{j}_{hor}(\vec{y}) \wedge \frac{\vec{x} - \vec{y}}{\|\vec{x} - \vec{y}\|^3} dy \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3.$$

D'un point de vue numérique, une fois \vec{j}_{hor} connu, nous calculons l'intégrale précédente avec un algorithme parallèle afin de diminuer le temps de calcul.

Une remarque doit encore être faite au sujet des effets ferromagnétiques. En effet, les champs d'induction créés par les cuves voisines peuvent déstabiliser le mouvement de l'interface. Si cette déstabilisation est prolongée, elle peut conduire à des courts-circuits qui peuvent mettre la cuve hors d'usage. Le caisson soutenant la cuve étant constitué de matériaux ferromagnétiques, celui-ci atténue l'action du champ d'induction des cuves voisines par *un effet d'écran*. Nous tiendrons compte du ferromagnétisme dans nos simulations, mais nous n'allons pas entrer dans la modélisation, ni dans la résolution numérique de ce problème. Le lecteur intéressé trouvera les méthodes utilisées dans [19].

2.4 Thermique

Afin d'alléger l'exposé, nous n'allons pas établir les équations modélisant l'évolution de la température à partir des principes fondamentaux de la thermodynamique (des détails peuvent être trouvés dans [46] par exemple). Nous utilisons ici la modélisation du problème thermique développée dans [48]. Nous rappelons que Λ représente la totalité de la cuve d'électrolyse d'aluminium. Nous supposons ici que le champ de vitesse \vec{u} , la densité de courant \vec{j} et l'interface Γ sont connus pour tout t .

Nous faisons également les hypothèses simplificatrices suivantes : l'énergie produite ou absorbée par les réactions chimiques est négligeable, tout comme l'énergie produite par des forces mécaniques (comme par exemple la déformation ou la dissipation visqueuse). Ainsi, l'unique source d'énergie est celle dissipée par effet joule du courant dont la densité est donnée par

$$S = \frac{\|\vec{j}\|^2}{\sigma}.$$

Soit C_p la chaleur spécifique. Dans le cadre de ce travail, nous supposons, pour simplifier, que C_p ne dépend pas de la température, tout comme la densité ρ , et que le produit ρC_p est le même pour tous les composants de la cuve. En notant H l'enthalpie, T la température, κ la conductivité thermique, l'équation régissant le problème thermoélectrique est

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa(T) \vec{\nabla} T) + \rho C_p \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T = \frac{\|\vec{j}\|^2}{\sigma(T)}. \quad (2.27)$$

Sous les hypothèses précédentes, la relation liant l'enthalpie H à la température T est

$$H(T) = \rho C_p T + L f_l(T), \quad (2.28)$$

où L est la chaleur latente de fusion et $f_l : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ est la fraction liquide. Notons que la relation (2.28) est une fonction monotone croissante. Ainsi, il existe une fonction $\beta : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ telle que

$$\beta(H(T)) = T \text{ pour tout } T. \quad (2.29)$$

Nous complétons le problème (2.27) par une condition initiale T_0 sur la température et par des conditions au bord dites naturelles. Ainsi, nous imposons que

$$\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = \alpha(T_a - T) \quad \text{sur } \partial\Lambda, \quad (2.30)$$

où $\alpha > 0$ est le coefficient d'échange thermique et T_a la température de l'air entourant Λ . Les conditions de bord (2.30) sont équivalentes à dire que le flux thermique sur le bord du domaine est proportionnel à la différence de température entre Λ et la température de l'air entourant la cuve. Par souci de simplicité, nous prenons T_a constante par morceaux autour de Λ . Ainsi, le problème (2.27) devient : trouver des fonctions $H : (0, \infty) \times \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ et $T : (0, \infty) \times \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa(T) \vec{\nabla} T) + \rho C_p \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T = \frac{\|\vec{j}\|^2}{\sigma(T)}, \\ H(T) = \rho C_p T + L f_l(T), \\ \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = \alpha(T_a - T), \\ T(t_0) = T_0. \end{array} \right. \quad (2.31)$$

Formulation faible

Après intégration par partie, la formulation faible de (2.31) est : pour presque tout $t \in (0, \infty)$, trouver $H(t), T(t) \in H^1(\Lambda)$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \int_{\Lambda} H \psi dx + \int_{\Lambda} \left(\kappa(T) \vec{\nabla} T \cdot \vec{\nabla} \psi + \rho C_p (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T) \psi \right) dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha T \psi ds \\ \quad = \int_{\Lambda} \frac{\|\vec{j}(T)\|^2}{\sigma(T)} \psi dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha T_a \psi ds, \\ H = \rho C_p T + L f_l(T), \\ T(t_0) = T_0, \end{array} \right. \quad (2.32)$$

pour tout $\psi \in H^1(\Lambda)$.

2.5 Couplages entre les problèmes

La résolution numérique des problèmes (2.2), (2.14), (2.26) et (2.31) est ardue à cause des interactions entre ceux-ci (voir la FIGURE 2.2 pour un résumé). En effet, lorsque le bain électrolytique se solidifie, celui-ci devient un isolant électrique, ce qui modifie la répartition du courant dans la cuve. Cette adaptation du courant aux zones solides influence à son tour la solidification par un changement de l'effet joule du courant. De plus, la solidification modifie l'écoulement des fluides par un changement du domaine liquide Ω_{liq} . Cette perturbation du champ de vitesse \vec{u} influence à son tour la solidification par un changement de la convection de la température. Ainsi, le problème thermique est fortement couplé aux problèmes hydrodynamique et électrique.

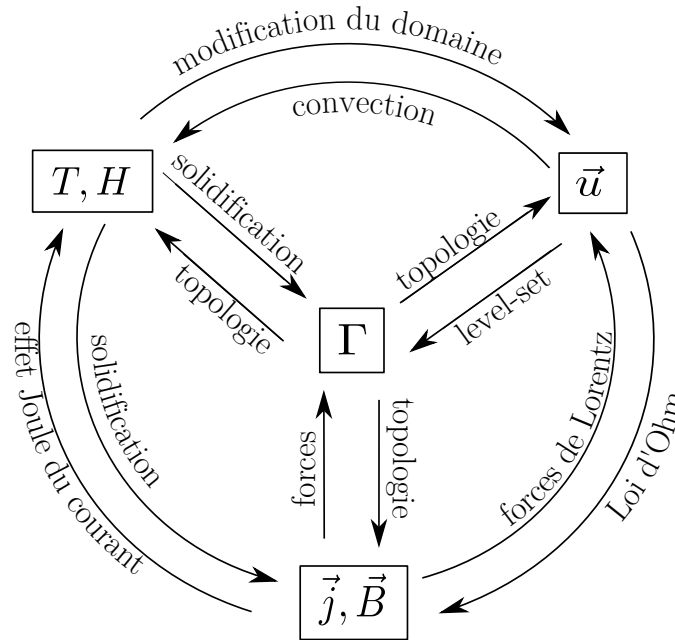


FIGURE 2.2 – Couplage entre les différents aspects du problème. Ici, T représente la température, H l'enthalpie, \vec{u} le champ de vitesse, \vec{j} la densité de courant, \vec{B} le champ d'induction et Γ l'interface.

Le champ de vitesse est également lié au courant via la force \vec{f} agissant sur les fluides, somme de la force de gravité et des forces de Lorentz,

$$\vec{f} = \rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B},$$

et le courant \vec{j} au champ de vitesse \vec{u} par la loi d'Ohm

$$\vec{j} = \sigma(\vec{E} + \vec{u} \wedge \vec{B}).$$

La situation se complique encore lorsque nous ajoutons l'interface aluminium-bain dans notre modèle. En effet, une modification de l'interface change la topologie du domaine, ce qui se traduit par un changement du courant, des forces de Lorentz et de l'effet joule. Mais une modification des zones solides, du champ de vitesse ou du courant influence également la position de l'interface.

2.6 Conclusions

La résolution du problème global étant très complexe à cause des interactions mentionnées précédemment, afin de simplifier la résolution numérique, nous découplons les problèmes MHD-thermique et MHD avec interface libre. Ainsi, nous supposons que l'interface Γ est connue et fixe au cours du temps pour les calculs des zones solides stationnaires. De même, nous faisons l'hypothèse que les talus sont donnés et fixes lors des calculs d'interfaces aluminium-bain stationnaires.

Malgré la séparation du problème MHD-thermique de celui d'interface libre, de nombreuses interactions entre l'hydrodynamique, l'électromagnétisme et l'aspect thermique restent présentes, ce qui entraîne des difficultés numériques. L'approche choisie dans ce travail consiste à résoudre chaque aspect du problème (hydrodynamique, thermique, électrique ou interface libre) en connaissant une solution numérique de toutes les autres parties du problème et d'actualiser les autres variables avec le champ qui vient d'être calculé (voir TABLE 2.1 et les chapitres suivants). Par exemple, lors du calcul de la température T , nous supposons que la densité de courant \vec{j} , la vitesse \vec{u} et l'interface Γ sont connues.

Inconnues	Champs supposés connus
\vec{j}, V	T, H, Γ, \vec{u} et \vec{B}
\vec{u}	T, H, Γ, \vec{j} et \vec{B}
Γ	H, T, \vec{u}
T, H, f_l	\vec{j}, \vec{u} et Γ

TABLE 2.1 – Champs supposés connus pour le calcul des inconnues.

Plus précisément, nous utilisons en guise de méthode itérative une méthode de marche temporelle afin de calculer les solutions stationnaires des problèmes MHD-thermique et MHD avec interface libre. Soit $\Delta t > 0$ le pas de temps et soit $t_n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$ une discrétisation uniforme de l'intervalle $(0, \infty)$. La méthode de marche temporelle consiste à calculer les valeurs des inconnues (T, H, \vec{u} , etc.) au temps t_{n+1} à partir de leur valeur au temps t_n . Il faut néanmoins fixer les valeurs initiales de chacune des variables. Dans notre cas, cela revient à donner une température initiale T_0 , une interface initiale Γ_0 et le champ d'induction \vec{B} correspondant à une interface aluminium-bain horizontale.

Calcul de la frontière solide-liquide stationnaire

Nous présentons à présent l'algorithme utilisé pour trouver la solution stationnaire du problème MHD-thermoélectrique. Celui-ci se résume à :

A1. Initialisation

- Créer un maillage conforme à la position de l'interface aluminium-bain initiale Γ_0 .
- Poser $T(0) = T_0$ et calculer l'enthalpie initiale H_0 en utilisant la relation (2.28).

B1. Itération

Pour tout $n \in \mathbb{N}$, calculer :

- La densité de courant $\vec{j}(t_{n+1})$ en résolvant le problème (2.26), puis en appliquant la formule (2.23). Autant dans (2.26) que dans (2.23), le champ de vitesse utilisé pour calculer $\vec{j}(t_{n+1})$ est $\vec{u}(t_n)$.
- Le champ de vitesse $\vec{u}(t_{n+1})$ en résolvant les équations de Navier-Stokes **stationnaires** en utilisant la densité de courant $\vec{j}(t_{n+1})$ pour le calcul des forces $\rho\vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$ agissant sur les fluides. Pour le terme de pénalisation de Carman-Kozeny, nous utilisons la fraction liquide f_l définie par l'enthalpie $H(t_n)$.
- La température $T(t_{n+1})$ en résolvant le problème (2.32) sur l'intervalle (t_n, t_{n+1}) , avec $\vec{u}(t_{n+1})$ comme champ de vitesse et $\vec{j}(t_{n+1})$ comme densité de courant.

L'échelle temporelle du phénomène de solidification étant bien plus grande que celle du problème hydrodynamique, nous avons fait l'hypothèse que les équations de Navier-Stokes ont convergé vers une solution stationnaire entre deux itérations de l'algorithme B1. C'est pour cette raison que les équations de Navier-Stokes stationnaires sont utilisées pour le calcul de $\vec{u}(t_{n+1})$.

Calcul de l'interface bain-métal stationnaire

Nous décrivons à présent la méthode de marche temporelle utilisée pour calculer l'interface aluminium-bain stationnaire lorsqu'il y a présence de talus. Comme précédemment, soit t_n , $n \in \mathbb{N}$ une discrétisation uniforme de l'intervalle $(0, \infty)$. Soient encore \vec{u}_0 un champ de vitesse initial, Γ_0 une interface initiale, \vec{B} le champ d'induction correspondant à une interface plane et H_0 l'enthalpie correspondant à une solution MHD-thermique stationnaire. L'algorithme utilisé pour le calcul de l'interface bain-métal stationnaire est le suivant :

A2. Initialisation

- Poser $\Gamma(0) = \Gamma_0$ et $\vec{u}(0) = \vec{u}_0$.

B2. Itération

Pour tout $n \in \mathbb{N}$, calculer :

- La densité de courant $\vec{j}(t_{n+1})$ en résolvant le problème (2.26), puis en appliquant la formule (2.23). Autant dans (2.26) que dans (2.23), le champ de vitesse utilisé afin de calculer $\vec{j}(t_{n+1})$ est $\vec{u}(t_n)$.
- Le champ de vitesse $\vec{u}(t_{n+1})$ en résolvant le problème (2.12) sur l'intervalle (t_n, t_{n+1}) en utilisant la densité de courant $\vec{j}(t_{n+1})$ pour le calcul des forces $\rho\vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$ agissant sur les fluides. Pour le terme de pénalisation de Carman-Kozeny, nous utilisons la fraction liquide f_l définie par l'enthalpie stationnaire H_0 .
- L'interface au temps t_{n+1} en résolvant l'équation (2.14) sur l'intervalle (t_n, t_{n+1}) avec $\vec{u}(t_{n+1})$ comme champ de vitesse.

Le découplage utilisé dans les deux méthodes présentées précédemment rend la résolution numérique des problème MHD-thermique et d'interface libre plus aisée. La suite de ce travail est consacrée à la description des différentes méthodes numériques utilisées pour calculer les solutions stationnaires des problèmes MHD-thermique et MHD avec interface libre.

Chapitre 3

Méthodes eulériennes

Nous débutons ce chapitre par un survol des différentes techniques utilisées pour résoudre un problème d'interface libre, ainsi qu'une motivation à l'utilisation de méthodes eulériennes (des approches où le maillage de calcul reste fixe au cours du temps et l'interface se déplace librement dans ce dernier). La seconde partie est consacrée à la description de l'algorithme de raffinement local du maillage utilisé dans le cadre de ce travail.

3.1 Motivations

Dans le logiciel ALUCCELL, le calcul de l'interface aluminium-bain Γ est fait par une méthode *lagrangienne*, c'est-à-dire une méthode où le maillage du domaine fluide est déformé pour suivre le mouvement de l'interface. Cette technique fonctionne avec succès pour les calculs d'interface libre en MHD pure (sans tenir compte de l'aspect thermique), mais est inadaptée s'il y a présence de régions solidifiées ou d'isolants sur le bord des fluides. De plus, dans l'approche lagrangienne, lorsque l'interface aluminium-bain se rapproche d'une anode, le maillage est très comprimé sous l'anode, ce qui entraîne des erreurs numériques et une augmentation du conditionnement des matrices associées aux systèmes linéaires.

L'utilisation de la pénalisation de Carman-Kozeny dans les équations de Navier-Stokes (voir section 2.1) entraîne que la vitesse \vec{u} est nulle dans le domaine solide Ω_s . L'évolution de l'interface étant régie par l'équation

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.1)$$

la relation (3.1) se réduit à

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \quad \text{dans } \Omega_s, \quad (3.2)$$

et donc φ ne varie plus au cours du temps dans le domaine Ω_s . L'interface Γ étant définie comme l'ensemble des zéros de la fonction φ , la relation (3.2) entraîne que Γ reste fixe dans les talus. Ainsi, la déformation du maillage pour suivre le mouvement de l'interface est uniquement faite dans le domaine liquide Ω_l , ce qui a pour conséquence que les tétraèdres situés

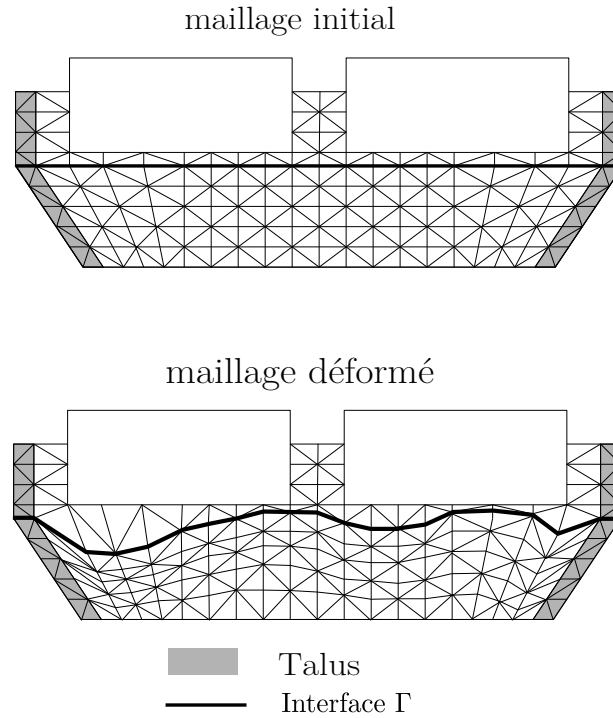


FIGURE 3.1 – Comportement de la déformation du maillage dans les talus avec une méthode lagrangienne.

à la frontière solide-liquide sont très étirés (voir la FIGURE 3.1). D'un point de vue numérique, l'allongement de ces éléments engendre des difficultés pour la résolution des systèmes linéaires associés aux équations aux dérivées partielles. Dans certains cas, les tétraèdres sont tellement étirés que les systèmes linéaires deviennent singuliers. Pour ces raisons, les talus ne sont pas pris en compte dans ALUCCELL lorsque l'approche lagrangienne est utilisée.

Une autre difficulté de l'approche lagrangienne est la conformité du maillage lorsqu'il y a des isolants thermiques autour des fluides. En effet, la triangulation des fluides étant déformée pour suivre le mouvement de l'interface, il est nécessaire de déplacer les nœuds des isolants afin de garder le maillage géométriquement conforme. Si le domaine Ω_s était connu de manière explicite, il serait possible de faire cela en prolongeant la fonction level-set φ de manière harmonique du domaine Ω_l au domaine Λ , mais le coût de l'interpolation qui suivrait cette adaptation de la triangulation serait trop grand. En conséquence, nous optons pour l'utilisation d'une *approche eulérienne* pour le suivi de l'interface au cours du temps.

3.2 Survol des méthodes eulériennes

Une méthode *eulérienne* pour le suivi d'interface est une approche où l'interface est suivie de manière implicite au travers d'une fonction φ . Par exemple, pour la méthode du

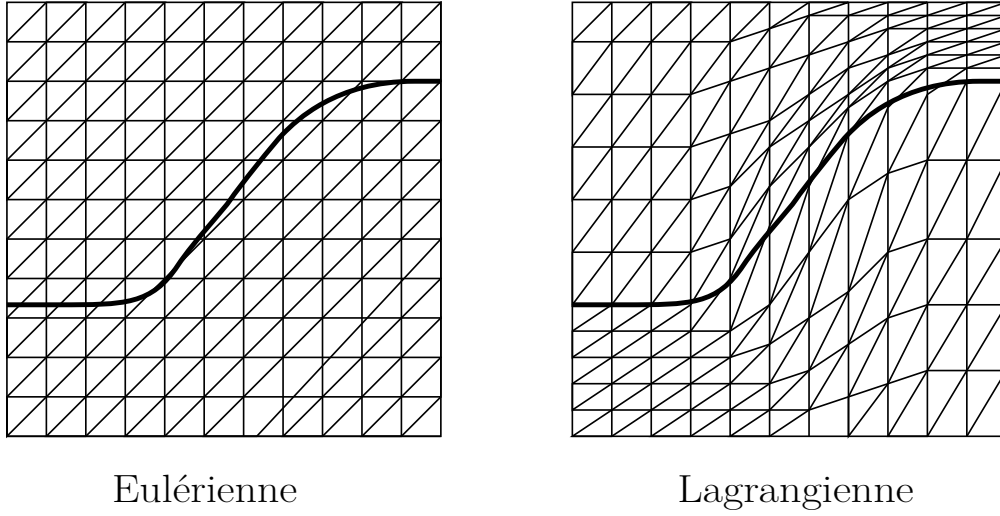


FIGURE 3.2 – Différence entre les approches eulérienne et lagrangienne. Le trait en gras représente l'interface entre les fluides.

level-set, cette fonction φ est la distance signée à l'interface et, dans le cas de la méthode *Volume of Fluid* (VOF), la fonction φ représente le pourcentage de fluide présent dans la cellule. Les avantages de cette classe de méthodes par rapport aux approches lagrangiennes sont les suivants : les changements de topologies sont traités de manière implicite et le maillage reste fixe aux cours du temps. Dans notre cas, cela signifie que l'interface aluminium-bain se déplace librement dans le maillage, comme illustré dans la FIGURE 3.2. Néanmoins, l'approche eulérienne a ses inconvénients, car il faut tenir compte de la discontinuité des paramètres physiques (densité, conductivité électrique, etc.) et de la discontinuité du gradient des différents variable (p. ex. la pression p , la température T ou le potentiel V) dans les tétraèdres traversés par l'interface. Nous passons maintenant en revue plusieurs méthodes permettant de traiter les difficultés mentionnées ci-dessus.

Galerkin standard

Soit \mathcal{T}_h une triangulation en tétraèdre du domaine Ω telle que $\text{diam}(K) < h$ pour tout $K \in \mathcal{T}_h$. Une première approche consiste à utiliser la méthode de Galerkin sur le maillage fixe \mathcal{T}_h pour résoudre numériquement les différents problèmes (les équations de Navier-Stokes, le transport de l'interface, le problème thermique et celui du potentiel). Numériquement parlant, cela revient à dire que nous tenons compte de la position de l'interface uniquement dans l'étape d'intégration. L'avantage de cette méthode est que le nombre d'inconnues associé aux systèmes linéaires reste constant au cours du temps, mais nous perdons de la précision en diminuant l'ordre de convergence (voir [3]). En effet, la discontinuité des paramètres physiques à l'interface entraîne une perte de régularité de la solution globale qui a pour conséquence que l'ordre de convergence de cette méthode est $\mathcal{O}(h^{\frac{1}{2}})$ dans le cas des éléments finis d'ordre 1.

XFEM

La méthode XFEM (*extended finite element method*), introduite par Belytschko dans [4], consiste à ajouter des fonctions de base discontinues dans les tétraèdres traversés par l'interface afin de résoudre un problème de croissance de fracture. Depuis, cette méthode a été employée avec succès dans de nombreuses applications, telles que les écoulements de fluides à deux phases [26, 9], la croissance de fractures [4], ou encore des problèmes de solidification [10]. Nous trouvons également des variantes de cette méthode dans la littérature. En effet, certains auteurs ajoutent des fonctions continues avec gradients discontinus [12] dans les tétraèdres traversés par l'interface.

Néanmoins, le choix des fonctions de base ajoutées à l'espace éléments finis dépend des problèmes considérés, et de telles fonctions ne sont pas toujours faciles à trouver. À notre connaissance, il n'y a pas de résultats généraux sur la convergence de cette méthode, la vitesse de convergence dépendant des fonctions de base ajoutées. Dans certains cas, des estimations d'erreurs peuvent être obtenues [47].

Autres approches

Les discontinuités des différentes variables physiques (enthalpie, température, pression, etc.) ou du gradient de celles-ci sont dues au saut des propriétés physiques (densité, conductivité électrique, etc.) à l'interface aluminium-bain. En notant φ la fonction level-set, les propriétés physiques, comme la densité ρ , peuvent être obtenues à partir de φ via la relation suivante

$$\rho(\varphi) = \rho_{el}H(\varphi) + \rho_{al}(1 - H(\varphi)),$$

où $H(\varphi)$ est la fonction Heavyside donnée par

$$H(\varphi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \varphi < 0, \\ \frac{1}{2} & \text{si } \varphi = 0, \\ 1 & \text{si } \varphi > 0. \end{cases}$$

Les autres propriétés physiques sont obtenues de manière similaire à partir de φ . Ainsi, une stratégie consiste à lisser la fonction Heavyside H afin de diminuer le saut des propriétés physiques à l'interface. Dans [37], un tel lissage est donné par

$$H_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \varphi < -\varepsilon, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varphi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon}\right) \right] & \text{si } |\varphi| \leq \varepsilon, \\ 1 & \text{si } \varphi > \varepsilon. \end{cases}$$

avec $\varepsilon = \alpha h$, où h est le paramètre de maillage et $\alpha > 1$. C'est cette approche qui est généralement combinée avec la méthode du level-set pour le suivi de l'interface. Bien que cette méthode soit séduisante, son inconvénient principal est la perte de précision sur la position de l'interface.

Il existe d'autres méthodes eulériennes, mais nous n'allons pas les présenter ici sauf une : l'adaptation locale du maillage à la position de l'interface. Nous nous référons à [11, 53] pour un survol des autres méthodes possibles.

3.3 Adaptation locale du maillage

Soit \mathcal{T}_h un maillage en tétraèdres du domaine Ω , $\Delta t > 0$ et $t_n = n\Delta t$ une discrétisation uniforme de l'intervalle $(0, \infty)$. Avant de présenter cette méthode, nous introduisons la définition suivante :

Définition 3.3.1. Soit \mathcal{S}_h^n une triangulation du domaine Ω . Nous dirons que \mathcal{S}_h^n est conforme à la position de l'interface Γ au temps t_n si Γ est la réunion de faces de tétraèdres de \mathcal{S}_h^n .

Dans le cadre de ce travail, la méthode utilisée pour trouver l'interface aluminium-bain stationnaire est une méthode de marche temporelle combinée avec un raffinement local du maillage \mathcal{T}_h autour de l'interface Γ . Plus précisément, à chaque pas de temps n , nous raffinons le maillage \mathcal{T}_h en un maillage \mathcal{S}_h^n conforme à la position de l'interface Γ au temps t_n , et la résolution des problèmes (2.12), (2.14) et (2.26) sur l'intervalle (t_n, t_{n+1}) est effectuée sur le maillage raffiné \mathcal{S}_h^n . Cette méthode sera décrite en détails dans le chapitre 4, mais pour fixer les idées, celle-ci peut être résumée à : pour $n \in \mathbb{N}$, faire :

1. Raffiner le maillage \mathcal{T}_h en un maillage \mathcal{S}_h^n conforme à la position de l'interface Γ au temps t_n .
2. Interpoler les différents champs dépendant du temps ($\vec{u}(t_n)$, $\varphi(t_n)$) du maillage \mathcal{T}_h au maillage \mathcal{S}_h^n .
3. Résoudre les problèmes (2.12), (2.14) et (2.26) sur le maillage \mathcal{S}_h^n pour trouver $\vec{u}(t_{n+1})$ et $\Gamma(t_{n+1})$.
4. Restreindre les différentes variables dépendant du temps ($\vec{u}(t_{n+1})$, $\varphi(t_{n+1})$) du maillage \mathcal{S}_h^n au maillage \mathcal{T}_h et aller au pas de temps suivant.

Cette approche a déjà été utilisée avec succès dans [8, 32, 34]. Du fait de la conformité du maillage à la position de l'interface, nous obtenons à nouveau les ordres de convergence optimaux. La principale difficulté de cette approche consiste à raffiner le maillage fixe \mathcal{T}_h en un maillage \mathcal{S}_h^n satisfaisant les conditions suivantes :

1. \mathcal{S}_h^n doit être un maillage géométriquement conforme, c'est-à-dire que l'intersection de deux tétraèdres distincts de \mathcal{S}_h^n est soit vide, soit un sommet, soit une arête, soit une face.
2. \mathcal{S}_h^n doit être conforme à la position de l'interface Γ au temps t_n au sens de la définition 3.3.1.
3. \mathcal{S}_h^n ne doit pas contenir d'éléments trop plats.
4. Le nombre de nœuds ajoutés à \mathcal{T}_h pour obtenir \mathcal{S}_h^n doit être minimal.

Les trois premières exigences sont des conditions usuelles pour les maillages utilisés par la méthode des éléments finis. La quatrième condition est là afin d'éviter une augmentation trop importante du temps de calcul. En effet, si le nombre de nœuds ajoutés par le raffinement est grand, le temps de calcul pour la résolution des différents problèmes augmente drastiquement. D'autre part, si le nombre de sommets ajoutés est faible, le nombre de simplexes plats est grand. Ainsi, les exigences 3 et 4 ne peuvent être satisfaites simultanément. Il est donc nécessaire de faire un compromis entre la qualité du maillage et le nombre de nœuds ajoutés lors du raffinement de \mathcal{T}_h .

Repérage des tétraèdres traversés par l'interface

Nous décrivons maintenant l'algorithme permettant d'obtenir un maillage raffiné \mathcal{S}_h^n conforme à la position de l'interface $\Gamma(t_n)$ à partir du maillage fixe \mathcal{T}_h . Soient Γ l'interface au temps t_n et φ la fonction level-set correspondante. Nous supposons ici que les valeurs de φ aux nœuds du maillage \mathcal{T}_h sont connues. Comme dans ce paragraphe nous considérons $\varphi(t, x, y, z)$ donnée en un temps t_n fixé, afin d'alléger l'écriture, nous omettons le paramètre t ainsi que l'indice et l'exposant n . Nous rappelons que le lien entre l'interface Γ et la fonction φ est le suivant

$$\Gamma = \{(x, y, z) \in \Omega : \varphi(x, y, z) = 0\}, \quad (3.3)$$

et que, pour des raisons numériques, φ est généralement prise comme la distance signée à l'interface Γ , c'est-à-dire

$$\varphi(\vec{x}) = \begin{cases} d(\vec{x}, \Gamma) & \text{si } \vec{x} \in \Omega_{el}, \\ -d(\vec{x}, \Gamma) & \text{si } \vec{x} \in \Omega_{al}, \\ \psi(\vec{x}) & \text{si } \vec{x} \in \Omega_s, \end{cases} \quad (3.4)$$

où $d(., .)$ est la distance euclidienne et ψ est une distance signée à l'interface $\Gamma \cap \Omega_s$.

Ainsi, tous les sommets v de \mathcal{T}_h tels que $\varphi(v) > 0$ se trouvent dans le bain électrolytique et tous les sommets v de \mathcal{T}_h tels que $\varphi(v) < 0$ se trouvent dans l'aluminium (voir FIGURE 3.3). En notant $v_i, i = 0, 1, 2, 3$, les sommets d'un tétraèdre $K \in \mathcal{T}_h$, il s'ensuit que si $\varphi(v_i) > 0$ (resp. $\varphi(v_i) < 0$) pour $i = 0, 1, 2, 3$ le tétraèdre K est entièrement compris dans le bain (resp. aluminium). Ainsi, les tétraèdres K dans lesquels passe l'interface sont ceux où φ n'est pas de signe constant sur les sommets de K . Cette caractérisation nous permet de trouver quels sont les tétraèdres qui doivent être partagés. Soit $\varepsilon_{alg} > 0$ une tolérance. Comme nous travaillons en précision machine, nous considérons que $x = 0$ si $|x| < \varepsilon_{alg}$. Ainsi, si $|\varphi(v)| < \varepsilon_{alg}$ pour le sommet v d'un tétraèdre $K \in \mathcal{T}_h$, cela signifie que v se trouve sur l'interface. L'énumération des différents cas possibles pour le partage donne une liste de 15 configurations distinctes en trois dimensions (voir FIGURE 3.4).

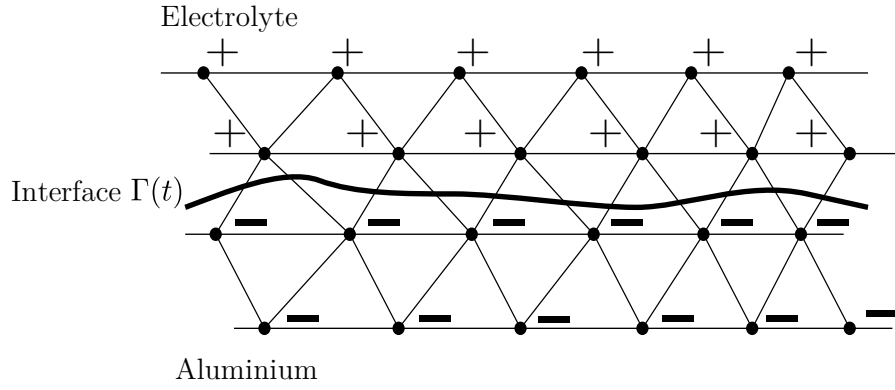


FIGURE 3.3 – Signe de la fonction level-set φ en fonction de la position de l'interface Γ dans le maillage fixe \mathcal{T}_h .

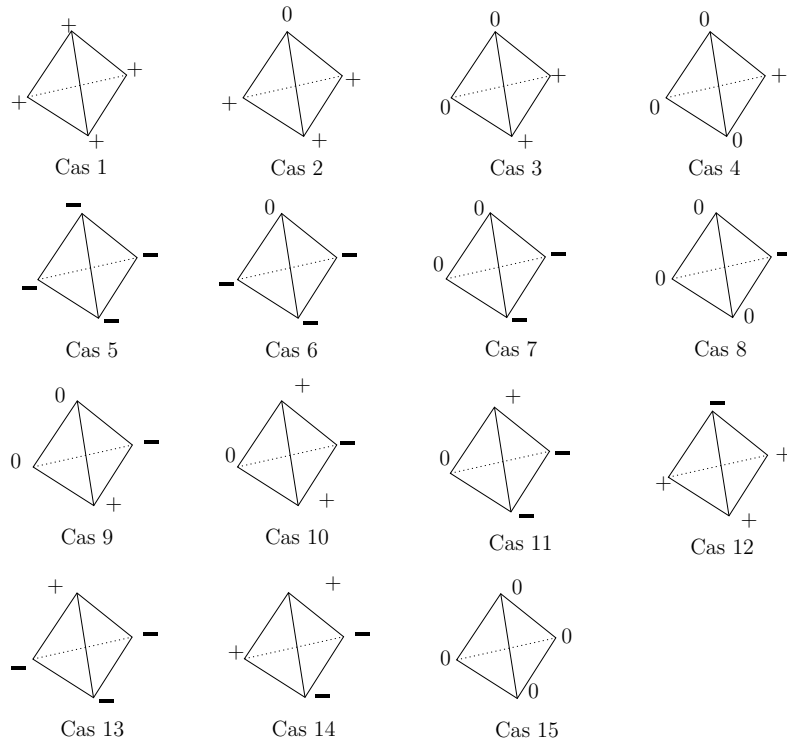


FIGURE 3.4 – Cas apparaissant lors de la découpe des tétraèdres.

Tolérance de découpe

Afin d'éviter que des tétraèdres de petit volume soient créés lors de la subdivision des tétraèdres, une tolérance géométrique de découpe $\varepsilon_{geom} \in]0, 0.5[$ est introduite. Notons $d(x, y)$ la distance euclidienne entre les points x et y . Soient v_1 et v_3 deux sommets de K tels que $\varphi(v_1)\varphi(v_3) < 0$ et notons v_{13} le point de l'arête v_1v_3 tel que $\varphi(v_{13}) = 0$. Le critère de découpe géométrique est alors le suivant : si $d(v_1, v_{13})/d(v_1, v_3) < \varepsilon_{geom}$ ou si $d(v_3, v_{13})/d(v_1, v_3) < \varepsilon_{geom}$, nous posons $\varphi(v_1) = 0$ dans le premier cas et $\varphi(v_3) = 0$ dans le second. L'interprétation géométrique de ce critère est la suivante : si la longueur de l'arête v_1v_{13} (resp. v_3v_{13}) est plus petite que $100 \cdot \varepsilon_{geom}\%$ de la longueur du segment v_1v_3 , nous faisons passer l'interface par le sommet v_1 (resp. v_3) du simplexe. Afin d'assurer la conformité du maillage raffiné, ce critère géométrique est appliqué avant l'algorithme de subdivision des tétraèdres traversé par l'interface. Une illustration de ce critère se trouve dans la FIGURE 3.5.

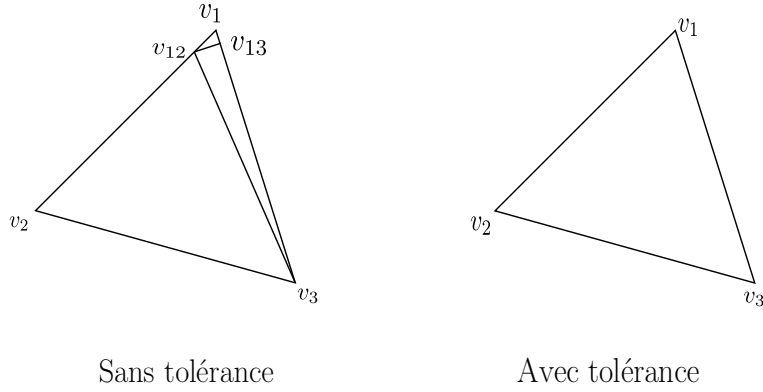


FIGURE 3.5 – Illustration de la tolérance pour la découpe des tétraèdres.

Dans l'exemple de la FIGURE 3.5, $\varphi(v_1) < 0$ et $\varphi(v_2), \varphi(v_3) > 0$. L'interface est composée du segment $v_{12}v_{13}$. Sans utilisation du critère géométrique, le triangle $v_1v_{12}v_{13}$ ajouté par la découpe est de petit volume. Nous supposons que $d(v_1, v_{13})/d(v_1, v_3) < \varepsilon_{geom}$. Par le critère de découpe géométrique, nous faisons passer l'interface par le sommet v_1 . Ceci a pour conséquence que le tétraèdre K n'est pas partagé, et donc que l'ajout d'un triangle de petit volume à notre maillage découpé a été évité.

3.3.1 Algorithme de raffinement du maillage

Le raffinement du maillage est basé sur les travaux de Caboussat et al. [7], avec quelques adaptations à notre situation. Lorsque nous raffinons \mathcal{T}_h , nous créons un maillage \mathcal{S}_h et une interface I composée de triangles telle que I soit une réunion de faces de tétraèdres de \mathcal{S}_h . Explicitement, le maillage \mathcal{S}_h ainsi créé et l'interface I satisfont les conditions suivantes :

- L'ensemble des sommets du maillage \mathcal{S}_h est de cardinalité N_h et $N_h \geq \text{Card}\{S(\mathcal{T}_h)\}$ où $S(\mathcal{T}_h)$ est l'ensemble des sommets du maillage \mathcal{T}_h .
- \mathcal{S}_h est composé de M_h tétraèdres, avec $h_K = \text{diam}(K) < h$ pour tout $K \in \mathcal{S}_h$.
- Le maillage \mathcal{S}_h est géométriquement conforme dans le sens que l'intersection de deux éléments de \mathcal{S}_h est soit vide, soit un sommet, soit une arête, soit une face.
- Un simplexe K de \mathcal{S}_h est soit entièrement contenu dans l'aluminium, soit entièrement contenu dans le bain.
- L'interface I est exclusivement composée de faces de tétraèdres se trouvant dans \mathcal{S}_h .

Nous allons maintenant décrire la création de \mathcal{S}_h et de I , en passant dans l'ordre chacun des cas listés dans la figure 3.4. Soit $K \in \mathcal{T}_h$ un tétraèdre et notons ses sommets v_0, v_1, v_2, v_3 . Quitte à renuméroter les sommets de K , nous supposons que v_0, v_1, v_2 et v_3 satisfont la propriété suivante :

$$\varphi(v_0) \leq \varphi(v_1) \leq \varphi(v_2) \leq \varphi(v_3).$$

Cas 1 à 8

Nous décrivons maintenant la subdivision des tétraèdres en fonction des différents cas de la FIGURE 3.4.

- Cas 1 : Tous les sommets de K sont dans l'électrolyte, i.e. $\varphi(v_i) > 0$ pour $i = 0, \dots, 3$.
- Cas 2 : Un sommet de K est sur l'interface, les trois autres dans l'électrolyte, ce qui correspond à $\varphi(v_0) = 0$ et $\varphi(v_i) > 0$ pour $i = 1, 2, 3$.
- Cas 3 : Deux sommets de K sont sur l'interface et les deux autres dans le bain, ce qui s'écrit $\varphi(v_0) = \varphi(v_1) = 0$ et $\varphi(v_i) > 0, i = 2, 3$.
- Cas 4 : Trois sommets de K se trouvent sur l'interface, et le dernier est dans l'électrolyte, i.e. $\varphi(v_i) = 0, i = 0, 1, 2$ et $\varphi(v_3) > 0$.

Dans les cas 1 à 4, il n'y a aucune subdivision du tétraèdre K . Dans le cas 4 uniquement, un triangle T est ajouté à l'interface I . Ce triangle T est composé des sommets v_0, v_1 et v_2 .

- Cas 5 : Tous les sommets de K se trouvent dans l'aluminium, i.e. $\varphi(v_i) < 0$ pour $i = 0, \dots, 3$.
- Cas 6 : Trois sommets de K sont dans l'aluminium et le dernier sommet est sur l'interface, ce qui s'écrit $\varphi(v_i) < 0$ pour $i = 0, 1, 2$ et $\varphi(v_3) = 0$.
- Cas 7 : Deux sommets de K sont dans l'aluminium et les deux autres sur l'interface, i.e. $\varphi(v_i) < 0, i = 0, 1$ et $\varphi(v_2) = \varphi(v_3) = 0$.
- Cas 8 : Un sommet de K est dans l'aluminium, les trois autres sont sur l'interface. Ceci correspond à $\varphi(v_0) < 0$ et $\varphi(v_i) = 0, i = 1, 2, 3$.

Comme précédemment, il n'y a pas de subdivision du tétraèdre K dans les cas 5 à 8, mais dans le cas 8, on ajoute un triangle T à l'interface I . A nouveau, le triangle T est composé des trois sommets de K se trouvant sur l'interface, c'est-à-dire de v_1, v_2 et v_3 .

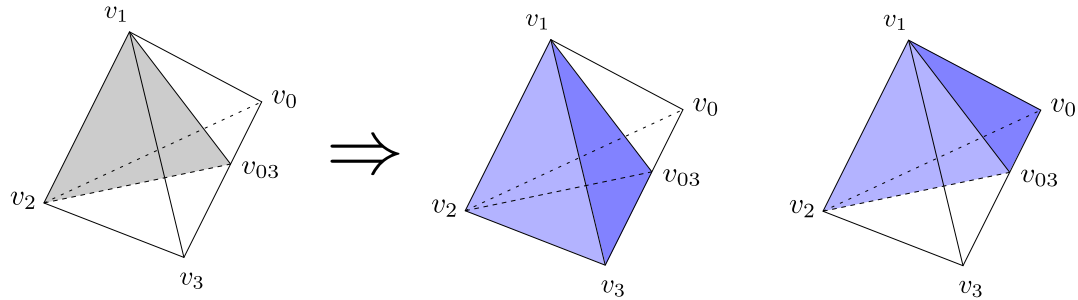


FIGURE 3.6 – Partage des tétraèdres dans les cas 9. Le triangle gris dans la figure de gauche représente l'interface aluminium bain. Les deux figures de droite représentent les deux nouveaux tétraèdres.

Cas 9

Le tétraèdre K a un sommet dans l'aluminium (v_0), deux sommets sur l'interface (v_1 et v_2) et un sommet dans le bain électrolytique (v_3). Nous commençons par trouver le point v_{03} où φ s'annule sur l'arête v_0v_3 . K est alors partagé en deux tétraèdres K_1 et K_2 , de sommets v_0, v_1, v_2, v_{03} et v_1, v_2, v_3, v_{03} respectivement, comme illustré dans la FIGURE 3.6. Un triangle T de sommets v_1, v_2, v_{03} est également ajouté à l'interface.

Critère de qualité

Afin d'expliquer la découpe des tétraèdres dans les cas 10 à 15, il est nécessaire d'introduire un critère de qualité. En effet, dans les cas restants, une face F du tétraèdre K possède deux sommets w_2 et w_3 se trouvant dans le même milieu et un sommet w_1 dans l'autre. Exprimer ceci en terme de la fonction φ , cela signifie que les sommets w_2 et w_3 sont de signe opposé à w_1 . Au moment de la découpe, nous introduisons deux sommets w_{12} et w_{13} tels que $\varphi(w_{12}) = \varphi(w_{13}) = 0$ et w_{12} (resp. w_{13}) se trouve sur l'arête w_1w_2 (resp. w_1w_3), comme illustré dans la FIGURE 3.7.

Les points w_{12} et w_{13} se trouvant sur l'interface, nous les relierons afin d'obtenir le segment $w_{12}w_{13}$ qui fera partie de l'interface I . Ce segment sépare la face F en un triangle T de sommets w_1, w_{12}, w_{13} et un quadrilatère Q composé des sommets w_2, w_3, w_{12}, w_{13} . Afin d'obtenir un maillage composé uniquement de tétraèdres, il est nécessaire de subdiviser Q en triangles. Une possibilité consiste à prendre une des diagonales $d_i, i = 1, 2$ du quadrilatère Q pour le partager en deux triangles T_1 et T_2 , comme illustré dans la FIGURE 3.7. Nous choisissons la diagonale d_i de Q qui maximise $\min\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6\}$ où $\alpha_i, i = 1, \dots, 6$ sont les angles des triangles T_1 et T_2 . Ce critère nous permet d'avoir les triangles T_1 et T_2 les moins plats possible (voir FIGURE 3.7). Dans le cas éventuel où ce critère de qualité ne permet pas de choisir une des diagonales, nous prenons la diagonale d_i issue du sommet w_j de Q ayant le plus petit numéro de nœud.

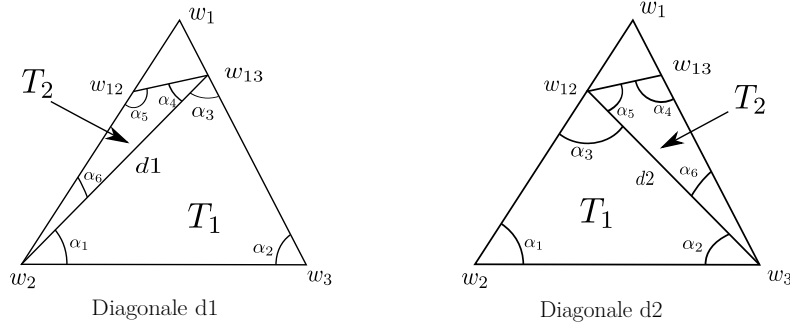


FIGURE 3.7 – Illustration du choix de la diagonale dans le critère de qualité. La diagonale d_i choisie est celle qui maximise $\min\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6\}$.

Cas 10 et 11

La découpe du tétraèdre K ne sera présentée que dans le cas 10, le cas 11 pouvant être ramené au cas 10 en permutant les rôles des sommets aluminium-bain (c'est à dire que les sommets aluminium deviennent des sommets bain et réciproquement). Pour rappel, le cas 10 est celui où deux sommets v_2 et v_3 du tétraèdre K sont dans le bain, un sommet v_1 est sur l'interface et le dernier sommet v_0 est dans l'aluminium. Vu que $\varphi(v_0) < 0 < \varphi(v_2) < \varphi(v_3)$, nous commençons par chercher les points v_{03} et v_{02} pour lesquels φ s'annule sur les arêtes v_0v_3 et v_0v_2 respectivement. Soit Q le quadrilatère défini par les sommets v_2, v_3, v_{02} et v_{03} . Le quadrangle Q est alors partagé en deux triangles à l'aide du critère de qualité. Nous ajoutons alors le triangle T de sommets v_1, v_{02}, v_{03} à l'interface I et K est partagé en trois tétraèdres, comme illustré dans la FIGURE 3.8.

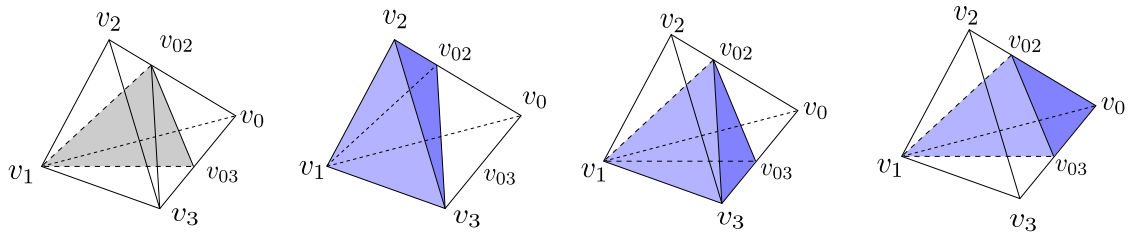


FIGURE 3.8 – Découpe du tétraèdre K dans le cas 10. Comme précédemment, le triangle gris de la figure située à gauche représente l'interface.

Cas 12 et 13

Comme précédemment, le partage de K en sous-tétraèdres ne sera présenté que dans un cas, l'autre cas pouvant être ramené au premier en inversant les rôles des sommets. Nous allons donc expliquer la découpe dans le cas 12, c'est-à-dire dans la situation où trois sommets v_1, v_2, v_3 de K sont dans le bain électrolytique et un sommet v_0 dans l'aluminium. Nous avons donc $\varphi(v_i) > 0$ pour $i = 1, 2, 3$ et $\varphi(v_0) < 0$. La fonction φ étant continue, celle-ci s'annule aux points v_{01}, v_{02} et v_{03} se trouvant sur les arêtes v_0v_1, v_0v_2 et v_0v_3 respectivement, comme illustré dans la FIGURE 3.9.

L'ajout de ces trois sommets fait apparaître trois quadrangles Q_1, Q_2 et Q_3 de sommets v_1, v_2, v_{01}, v_{02} pour Q_1 , v_2, v_3, v_{02}, v_{03} pour Q_2 , et v_1, v_3, v_{01}, v_{03} pour Q_3 . Soit P le prisme de sommets $v_1, v_2, v_3, v_{01}, v_{02}, v_{03}$. En choisissant la diagonale par le critère de qualité pour les quadrangles Q_1, Q_2, Q_3 , deux possibilités se présentent :

- (a) Il existe un sommet w de P duquel sont issues deux des diagonales partageant les quadrangles.
- (b) De chaque sommet w de P est issue exactement une des diagonales partageant les quadrangles.

Ces deux cas sont illustrés dans la FIGURE 3.9. Ces deux configurations vont conduire à une découpe différente du tétraèdre K . En effet, dans le cas (a), K sera subdivisé en 4 tétraèdres et dans le cas (b), en 9. Le partage de K dans les cas 12 (a) et 12 (b) est illustré dans les FIGURES 3.11 et 3.10 respectivement. Dans le cas 12 (b), en plus des sommets v_{01}, v_{02}, v_{03} , nous ajoutons un point v_b afin d'effectuer la subdivision du tétraèdre K . Dans notre cas, v_b est le barycentre du prisme P . Notons encore que dans les deux cas, nous ajoutons le triangle T de sommets v_{01}, v_{02}, v_{03} à l'interface I .

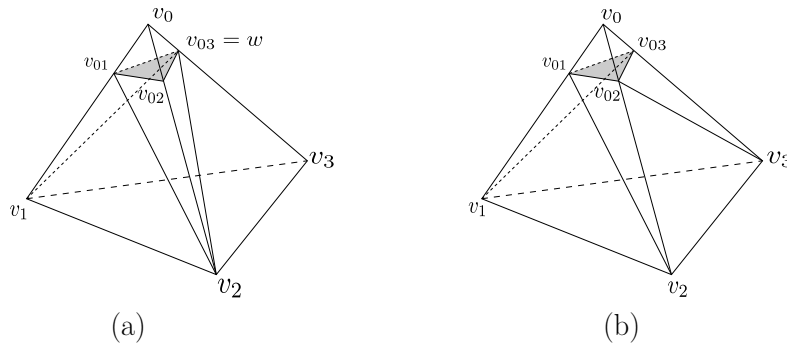


FIGURE 3.9 – Partage du tétraèdre dans le cas 12. Dans le cas (a), il existe un sommet w du prisme P de sommets $v_1, v_2, v_3, v_{01}, v_{02}, v_{03}$ tel que deux diagonales partageant les quadrangles sont issues de w . Dans le cas (b), pour chaque sommet w de P , exactement une diagonale partageant les quadrangles est issue de w . Dans les deux cas, le triangle gris représente l'interface aluminium-bain.

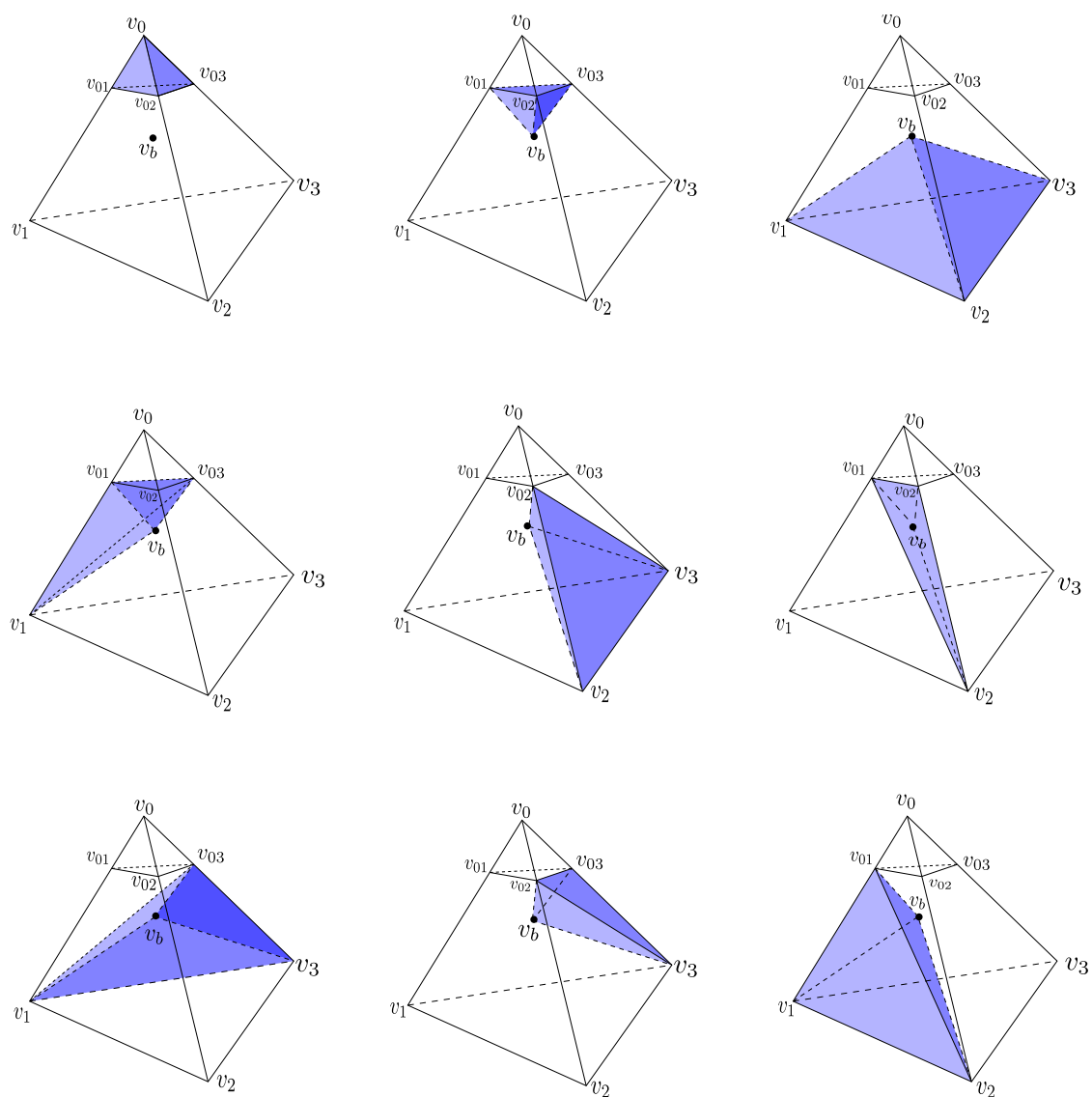


FIGURE 3.10 – Partage du tétraèdre K dans le cas 12 (b).

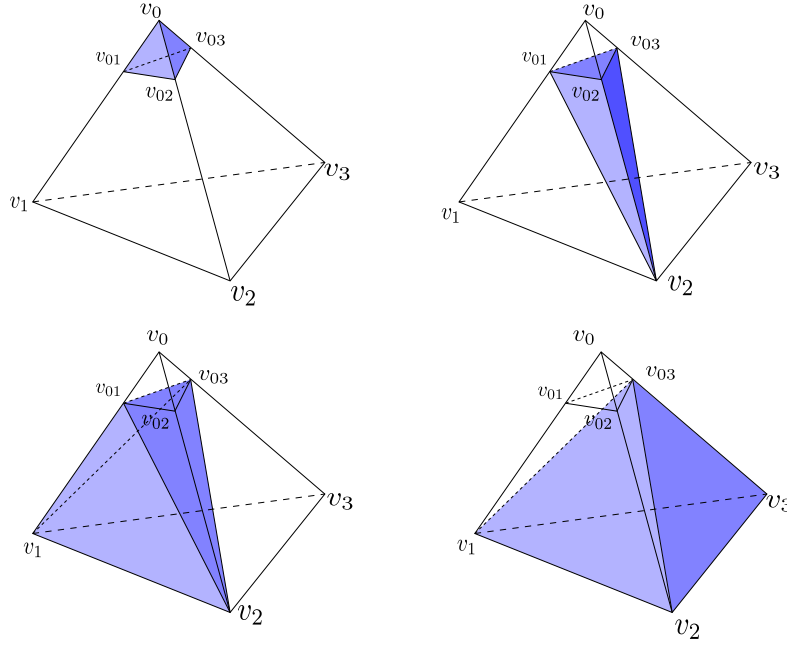


FIGURE 3.11 – Partage du tétraèdre K dans le cas 12 (a).

Cas 14

Nous allons à présent décrire le partage du tétraèdre K dans le cas 14, c'est-à-dire dans la situation où deux sommets de K (les sommets v_0 et v_1) sont dans l'aluminium et les 2 sommets restants (les sommets v_2 et v_3) se trouvent dans le bain électrolytique. L'algorithme de découpe sera expliqué uniquement pour la partie bain de K , le partage du domaine aluminium de K se faisant de manière similaire.

Les sommets v_2 et v_3 se trouvant dans le bain, nous avons $\varphi(v_2) > 0$ et $\varphi(v_3) > 0$ et pour les sommets v_0 et v_1 , situés dans l'aluminium, $\varphi(v_0) < 0$ et $\varphi(v_1) < 0$. La fonction φ étant continue, celle-ci s'annule sur les arêtes v_0v_2 , v_0v_3 , v_1v_2 et v_1v_3 aux points v_{02} , v_{03} , v_{12} et v_{13} respectivement, comme illustré dans la FIGURE 3.12. Ces quatre points forment un quadrilatère gauche G qui est divisé en deux triangles T_1 et T_2 qui sont ajoutés à l'interface I . La diagonale d utilisée pour le partage de G est choisie par le critère de qualité.

Ainsi, la partie bain du tétraèdre K est un prisme P de sommets $v_2v_3v_{02}v_{03}v_{12}v_{13}$. Les faces "quadrilatères" de P sont les suivantes : v_2, v_3, v_{12}, v_{13} pour la première, v_2, v_3, v_{02}, v_{03} pour la deuxième et $v_{02}, v_{03}, v_{12}, v_{13}$ pour la troisième. Ces faces sont notées Q_1 , Q_2 et Q_3 respectivement. Ensuite, pour chaque face Q_i , nous choisissons la diagonale d_i utilisée pour la découpe à l'aide du critère de qualité. Une fois le choix des diagonales effectués, deux possibilités se présentent : la première est qu'il existe un sommet v de P duquel sont issues deux diagonales partageant les quadrangles (cas 14 bain-a), et la deuxième est que pour tout sommet v de P , exactement une des diagonales partageant les quadrangles Q_i soit issue de

v (cas 14 bain-b). Ces deux configurations sont illustrées dans la FIGURE 3.12. Dans le cas 14 bain-a, la partie bain de K est découpée en trois tétraèdres, et en 8 tétraèdres dans le cas 14 bain-b. Ces subdivisions sont illustrées dans les FIGURES 3.13 et 3.14.

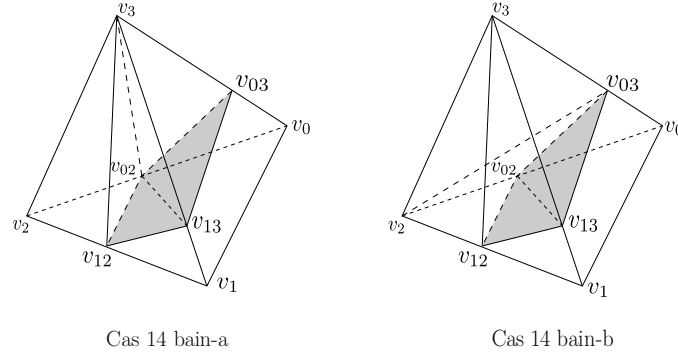


FIGURE 3.12 – Différents cas pour la partie bain du tétraèdre K dans le cas 14. Dans les deux figures, l'interface est représentée par l'union des deux triangles gris. Notons encore que le quadrangle G correspond également à l'union de ces deux triangles.

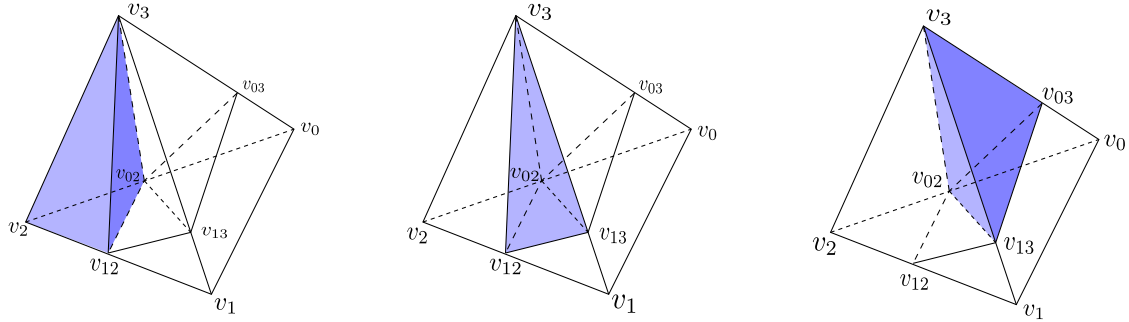


FIGURE 3.13 – Découpage du tétraèdre K dans le cas 14 bain-(a).

Cas 15

Dans ce cas, il n'y a pas de partage de K , car K fait entièrement partie de l'interface. Cette situation étant impossible, un message d'erreur est lancé lors de l'exécution du programme.

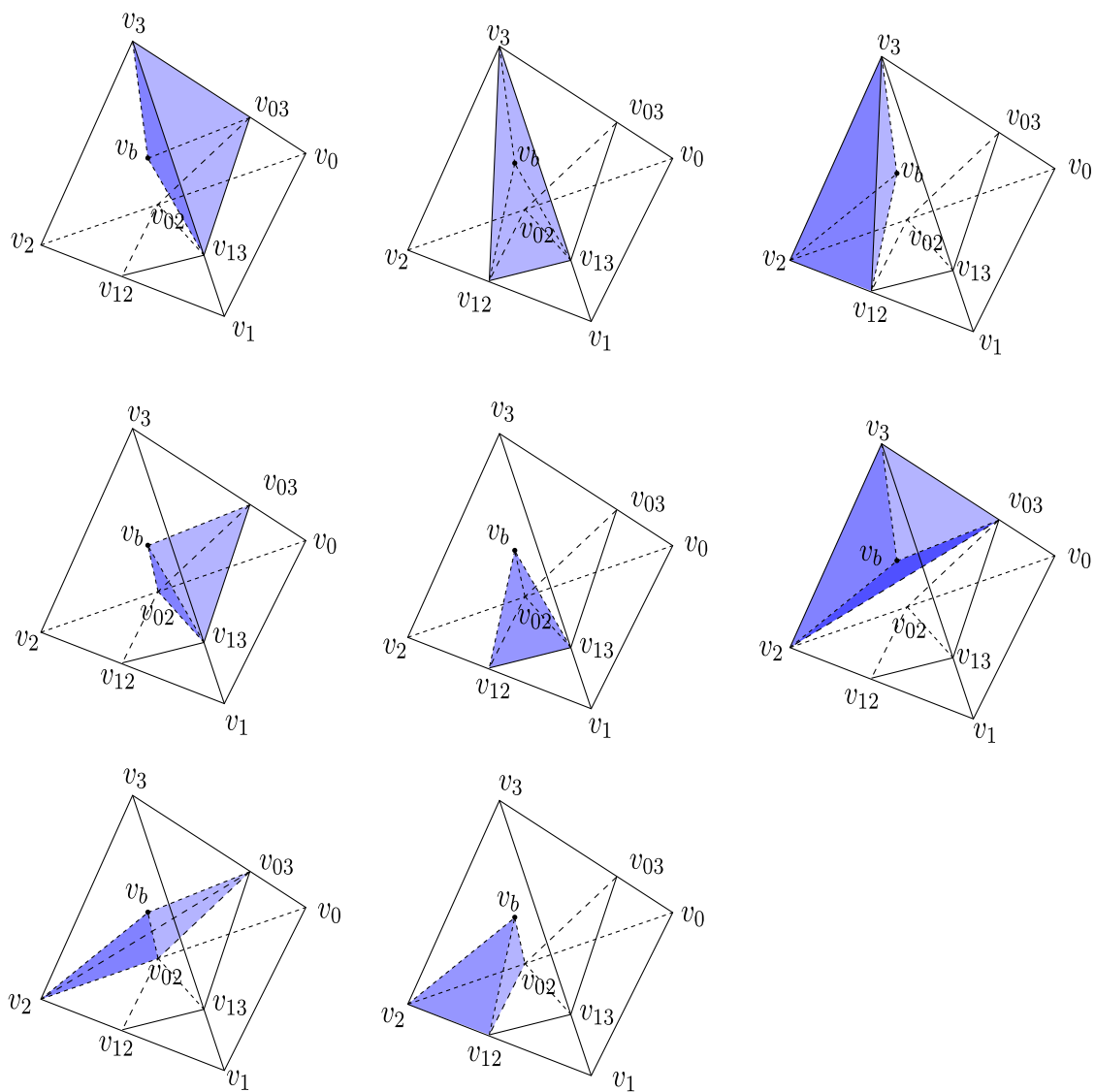


FIGURE 3.14 – Découpage du tétraèdre K dans le cas 14 bain (b).

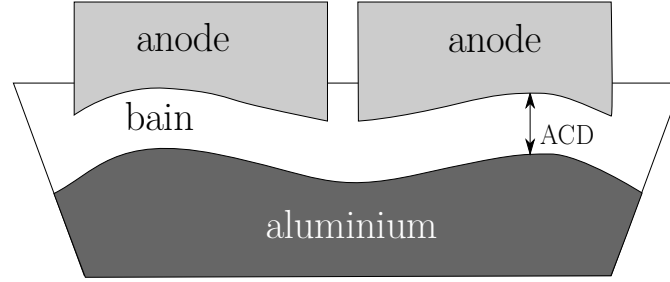


FIGURE 3.15 – Illustration de l'ACD.

3.4 Extensions du partage des tétraèdres

Avant d'exposer les extensions de l'algorithme de la section 3.3.1, il est nécessaire d'introduire le concept d'*identifiant matériaux*. Soit \mathcal{S}_h une triangulation de la cuve d'électrolyse Λ conforme à la position de l'interface Γ . Lors de la construction des matrices éléments finis liées aux différents problèmes, pour chaque $K \in \mathcal{S}_h$, il est nécessaire de connaître dans quel constituant de la cuve K se trouve afin de lui attribuer les valeurs correctes de la conductivité électrique σ , de la densité ρ , de la viscosité, etc. Pour faire cela, à chaque matériel i composant la cuve (aluminium, bain, anodes, cathodes, barres cathodiques, isolants, etc.) nous attribuons un entier n_i tel que $n_i \neq n_j$ si $i \neq j$. Cet entier n_i est appelé l'identifiant matériaux et pour tous les tétraèdres K de \mathcal{S}_h nous stockons l'identifiant matériaux du constituant de la cuve dans lequel K se trouve.

3.4.1 Découpe des anodes

Lors de la production industrielle d'aluminium, la densité de courant circulant entre les anodes et l'aluminium liquide est désirée constante, ce qui correspond dans la cuve à une distance verticale fixe entre les anodes et l'aluminium liquide car le bain est peu conducteur comparativement à l'aluminium. En effet, si la distance verticale aluminium liquide-anode est variable, le courant \vec{j} aura tendance à passer par les endroits où la distance verticale anode-aluminium liquide (ACD) est la plus faible, ce qui entraîne une consommation plus rapide des anodes dans ces zones et donc une augmentation de l'ACD. Ainsi, de manière naturelle, une ACD constante est obtenue dans les cuves d'électrolyse lorsqu'un régime stationnaire est atteint (voir FIGURE 3.15 pour une illustration géométrique de la distance ACD). Nous présentons à présent l'approche utilisée afin de garder une ACD constante. Nous commençons par rappeler quelques propriétés de la fonction level-set φ :

1. φ est la distance signée à l'interface Γ .
2. L'interface Γ est liée à φ via la relation $\Gamma = \{(x, y, z) \in \Omega : \varphi(x, y, z) = 0\}$.

Notons D le domaine occupé par les anodes. Dans la suite de ce travail, nous supposons que φ est définie sur le domaine $\Sigma = \Omega \cup D$. Notons encore par ACD la distance anode-

aluminium liquide que l'on désire avoir constante. En définissant $\Psi = \varphi - ACD$, la surface $\Gamma_a = \{(x, y, z) \in \Omega : \Psi(x, y, z) = 0\}$ correspond à l'interface Γ déplacée d'une distance ACD vers le haut. Ainsi, une stratégie consiste à raffiner le maillage fixe \mathcal{T}_h par rapport à la fonction Ψ et d'attribuer l'identifiant matériaux des anodes aux tétraèdres se trouvant dans le domaine $\Sigma^+ = \{(x, y, z) \in \Sigma : \Psi(x, y, z) > 0\}$ et celui du bain dans le domaine $\Sigma^- = \{(x, y, z) \in \Sigma : \Psi(x, y, z) < 0\}$. Le maillage obtenu par ce raffinement est noté \mathcal{S}_h^a .

Néanmoins, la fonction Ψ ainsi définie ne permet pas de considérer les canaux comme du bain électrolytique. En effet, comme φ est continue dans le domaine Σ et que φ est la distance signée à l'interface, Γ_a correspond à l'interface Γ déplacée vers le haut d'une hauteur ACD dans toute la cuve, même dans les canaux. Comme tous les tétraèdres se trouvant dans le domaine Σ^+ sont considérés comme faisant partie des anodes, les tétraèdres se trouvant à la fois dans les canaux et dans Σ^+ sont considérés comme faisant partie des anodes. Ceci est illustré dans la FIGURE 3.16.

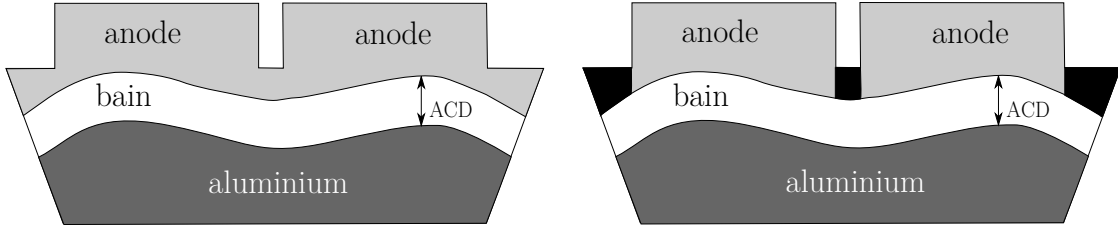


FIGURE 3.16 – Raffinement du maillage \mathcal{T}_h par rapport à la fonction Ψ . Les anodes sont représentées en gris clair, et les parties des anodes qui devraient être du bain en noir.

Nous résolvons cette difficulté en faisant du post-traitement pour attribuer l'identifiant matériaux du bain à tous les tétraèdres K de \mathcal{S}_h^a faisant partie à la fois des anodes et des canaux. Le maillage \mathcal{S}_h^a ainsi obtenu après post-traitement est alors conforme à la déformation des anodes, au sens de la définition 3.4.1.

Définition 3.4.1. Soit \mathcal{S}_h^a une triangulation du domaine $\Sigma = \Omega \cup D$, où D est le domaine occupé par les anodes. Le maillage \mathcal{S}_h^a est dit conforme à la déformation des anodes si ∂D est la réunion de faces de tétraèdres de \mathcal{S}_h^a et si les canaux ne font pas partie des anodes.

Remarque 3.4.2. Lorsque nous définissons $\Psi = \varphi - ACD$, nous déplaçons l'interface d'une distance égale à l' ACD , mais cela n'entraîne pas que l' ACD sera constante. En effet, c'est la distance normale entre la 0-surface de niveau de ψ et l'interface qui vaut ACD , et non la distance verticale. Comme l'écart entre une interface plane et l'interface stationnaire est de l'ordre de $10^{-3}[m]$ sous les anodes, l'erreur faite sur l' ACD avec cette méthode est faible.

3.4.2 Découpe des matériaux entourant les fluides

Nous rappelons que dans une cuve d'électrolyse, le creuset contenant les fluides est constitué de matériaux réfractaires isolants afin de limiter les pertes thermiques et éviter une

solidification totale du bain électrolytique. Comme nous étudions l'influence d'une interface aluminium-bain non plate sur les zones solides stationnaires, il est nécessaire d'avoir un maillage de la cuve conforme à la position de l'interface stationnaire Γ (au sens de la définition 3.3.1) lorsque les fluides sont entourés d'isolants. La présence de ces isolants nous oblige à étendre l'algorithme de partage des tétraèdres à toute la cuve afin d'obtenir un maillage raffiné géométriquement conforme. A cette fin, nous prolongeons la fonction level-set φ à la cuve d'électrolyse Λ et nous partageons les tétraèdres à l'aide de cette fonction (voir la FIGURE 3.17). Plus précisément, nous prolongeons $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ par une fonction $\Phi : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\Phi(\vec{x}) = \begin{cases} \varphi(\vec{x}) & \text{si } \vec{x} \in \Omega, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.5)$$

Soit \mathcal{T}_h une triangulation de la cuve Λ . Nous rappelons que Ω est le domaine occupé par les fluides. A cause de l'attribution d'un identifiant matériaux à chaque tétraèdre de \mathcal{T}_h , nous avons que pour tout tétraèdre K de \mathcal{T}_h , $K \cap \Omega = \emptyset$ ou $K \cap \Omega = K$. Afin de créer un maillage conforme à la position de l'interface en présence d'isolants, nous raffinons \mathcal{T}_h par rapport à la fonction Φ définie par (3.5). Néanmoins, nous ajoutons les conditions suivantes à la méthode de la section 3.3.1 :

1. L'interface Γ ayant un sens physique uniquement dans le domaine Ω , si un tétraèdre $K \not\subset \Omega$ est partagé, aucun triangle n'est ajouté à l'interface aluminium-bain.
2. Pour un simplexe K ne faisant pas partie des fluides, $\Phi|_K \equiv 0$ est cas un fréquent. Comme ce cas correspond au cas 15 de l'algorithme 3.3.1, aucun message d'erreur n'est lancé si $K \not\subset \Omega$ et $\Phi|_K \equiv 0$. Le tétraèdre K est ajouté au maillage raffiné.
3. Le partage d'un tétraèdre en une partie aluminium et une partie bain n'a de sens que si $K \subset \Omega$. Ainsi, si un tétraèdre $K \not\subset \Omega$ est partagé, tous les tétraèdres ajoutés par la subdivision de K auront le même identifiant matériaux que K .

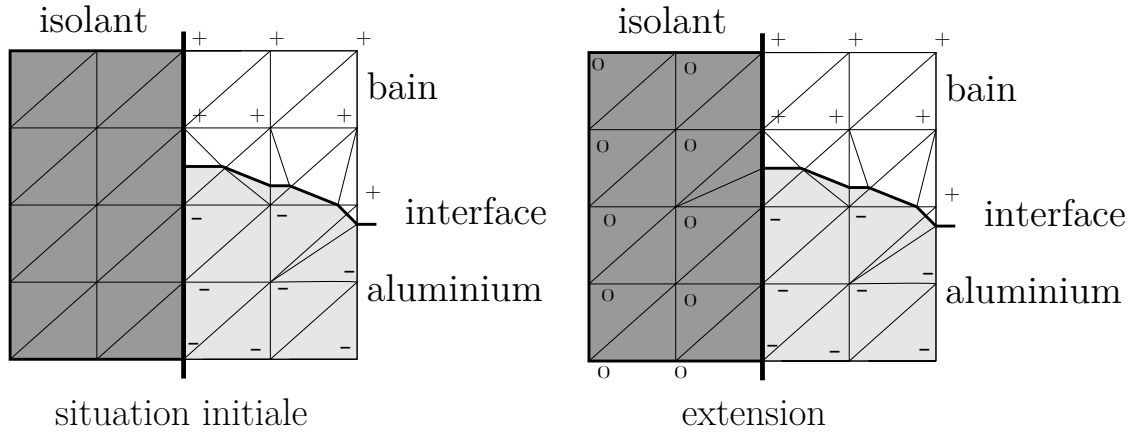


FIGURE 3.17 – Extension de la découpe des tétraèdres. Nous constatons que le maillage ainsi créé est géométriquement conforme.

3.5 Conclusions

Après avoir passé en revue les différentes méthodes eulériennes, notre choix s'est porté sur une adaptation locale du maillage à la position de l'interface. Nous avons décrit l'algorithme de raffinement utilisé dans notre travail, ainsi que ses extensions permettant de garder une ACD constante et garantissant la conformité géométrique du maillage raffiné lorsque des isolants entourent les fluides. Grâce aux méthodes présentées ici, nous pouvons dès lors détailler l'algorithme utilisé pour la résolution du problème MHD avec frontière libre lorsqu'il y a présence de talus. Cela est effectué dans le prochain chapitre.

Chapitre 4

MHD sur maillage fixe

Le but du présent chapitre est de présenter l'algorithme eulérien utilisé afin de déterminer l'interface aluminium-bain stationnaire. L'approche choisie dans ce document est de type transitoire, c'est-à-dire que la solution stationnaire est obtenue en résolvant les EDP (équations aux dérivées partielles) instationnaires. Par abus de langage, la méthode décrite ci-après sera souvent appelée *MHD sur maillage fixe*. Durant toute ce chapitre, nous supposons qu'une approximation H_h de l'enthalpie H est connue, ce qui entraîne que la fraction liquide l'est également (voir remarque 6.2.3). Nous supposons également connue une approximation numérique \vec{B}_h du champ d'induction \vec{B} .

Le chapitre est organisé comme suit : tout d'abord, nous présentons les schémas numériques utilisés pour la résolution numérique des différents problèmes (électromagnétique, hydrodynamique et interface libre). Puis nous exposons une méthode de lissage de l'interface ainsi qu'une approche permettant de conserver le volume d'aluminium. Nous présentons ensuite le procédé utilisé pour reconstruire la fonction level-set comme distance signée à l'interface ainsi qu'une interpolation efficace des différents champs sur le maillage raffiné. Nous terminons avec l'algorithme de résolution du problème MHD avec interface libre lorsqu'il y a solidification des fluides sur le bord du domaine.

4.1 Notations utilisées

Nous rappelons que l'approche utilisée pour trouver la solution stationnaire du problème MHD avec interface libre est une méthode de marche temporelle combinée avec une adaptation locale du maillage à la position de l'interface. Soit $\Delta t > 0$. Durant tout ce chapitre, nous utilisons une discrétisation uniforme $t_n = n\Delta t$ de l'intervalle $(0, \infty)$, où $n \in \mathbb{N}$. Ainsi, à chaque pas de temps, nous calculons les valeurs des inconnues au temps t_{n+1} à partir de leur valeurs au temps t_n et ce sur un maillage de la cuve d'électrolyse raffiné en fonction de la position de l'interface et de la déformation des anodes au temps t_n . Les raffinements de maillage sont effectués en utilisant la méthode de subdivision présentée au chapitre 3.

Afin d'alléger l'écriture des schémas numériques, nous introduisons les différentes notations utilisées dans ce chapitre. Notons \mathcal{S}_h^n une tétraédrisation de la cuve d'électrolyse Λ conforme à la position de l'interface et à la déformation des anodes au temps t_n (au sens des définitions 3.3.1 et 3.4.1). Notons encore \mathcal{U}_h^n un maillage en tétraèdres du domaine Ω conforme à la position de l'interface au temps t_n . Dans le cadre de la résolution numérique du problème MHD avec interface libre, il est nécessaire de prolonger des champs du maillage \mathcal{U}_h^n au maillage \mathcal{S}_h^n ou de restreindre des champs du maillage \mathcal{S}_h^n au maillage \mathcal{U}_h^n . Afin de réaliser cela de manière efficace, nous imposons une hiérarchie de maillage entre \mathcal{S}_h^n et \mathcal{U}_h^n . Nous supposons donc que \mathcal{S}_h^n est un prolongement du maillage \mathcal{U}_h^n dans le sens que

- En notant $S(\mathcal{S}_h^n)$ les sommets du maillage \mathcal{S}_h^n et $S(\mathcal{U}_h^n)$ les nœuds de la triangulation \mathcal{U}_h^n , alors $S(\mathcal{U}_h^n) \subset S(\mathcal{S}_h^n)$.
- $\mathcal{U}_h^n \subset \mathcal{S}_h^n$, c'est-à-dire que tout tétraèdre du maillage \mathcal{U}_h^n est un élément de la triangulation \mathcal{S}_h^n .

Soit $K \in \mathcal{S}_h^n$ (ou \mathcal{U}_h^n) et soit $\mathbb{P}^1(K)$ l'espace des fonctions polynomiales de degré 1 sur K . Soit encore P_{bc} un sommet de \mathcal{U}_h^n . Afin d'alléger l'écriture, nous introduisons maintenant les différents espaces éléments finis utilisés durant tout le chapitre. Le premier est l'espace de dimension finie \mathcal{J}_h^n défini par

$$\mathcal{J}_h^n = \{W \in C^0(\Omega) : W|_K \in \mathbb{P}^1(K), \forall K \in \mathcal{S}_h^n \text{ et } W(P_{bc}) = 0\}, \quad (4.1)$$

qui est utilisé pour le calcul du potentiel. Le second est l'espace de dimension finie

$$\mathcal{V}_h^n = \{\vec{v} \in (C^0(\Omega))^3 : \vec{v}|_K \in (\mathbb{P}^1(K) \oplus B_K)^3, \forall K \in \mathcal{U}_h^n \text{ et } \vec{v}|_{\partial\Omega} = \vec{0}\}, \quad (4.2)$$

où B_K est une fonction bulle sur K . Dans notre cas, nous utiliserons les fonctions bulles appelées *mini-éléments* (voir [44] page 311 pour plus de détails). Les derniers espaces utilisés dans nos schémas numériques sont

$$\mathcal{Q}_h^n = \{q \in C^0(\Omega) : q|_K \in \mathbb{P}^1(K) \forall K \in \mathcal{U}_h^n \text{ et } q(P_{bc}) = 0\}, \quad (4.3)$$

et

$$\mathcal{R}_h^n = \{\psi \in C^0(\Omega) : \psi|_K \in \mathbb{P}^1(K) \forall K \in \mathcal{U}_h^n\}, \quad (4.4)$$

qui sont utilisés pour calculer la pression et la fonction level-set au temps t_{n+1} . Comme nous désirons calculer les variables au temps t_{n+1} en fonction de leur valeur au temps t_n , durant tout ce chapitre nous supposons connu

- une approximation \vec{u}_h^n du champ de vitesse au temps t_n sur le maillage \mathcal{S}_h^n ,
- une approximation φ_h^n de la fonction level-set au temps t_n sur le maillage \mathcal{U}_h^n ,
- une approximation \vec{B}_h du champ d'induction \vec{B} sur le maillage \mathcal{S}_h^n .
- une approximation H_h de l'enthalpie H sur le maillage \mathcal{S}_h^n .

A priori, \vec{B}_h et H_h dépendent du temps à cause du mouvement de l'interface. Néanmoins, pour simplifier, nous supposons l'induction \vec{B}_h constante en temps dans un premier temps.

Nous rappelons que l'enthalpie H_h interagit avec le problème MHD avec interface libre par le processus de solidification et que l'échelle temporelle de ce phénomène est bien plus grande que celle des phénomènes MHD avec interface libre. Ainsi, pour des raisons de simplification, nous supposons l'enthalpie H_h constante en temps pour les calculs d'interface libre. Néanmoins, nous devons calculer la fraction liquide sur le maillage raffiné \mathcal{S}_h^n pour tout $n \in \mathbb{N}$, car nous avons besoin de celle-ci pour calculer l'approximation numérique de $\vec{u}(t_n)$.

4.2 Potentiel et courant

L'objectif de cette section est de présenter la méthode numérique utilisée pour le calcul de la densité de courant \vec{j}_h^{n+1} apparaissant dans les forces de Lorentz. Nous rappelons que la densité de courant est définie sur toute la cuve d'électrolyse Λ et qu'en conséquence, le calcul de \vec{j}_h^{n+1} est effectué sur le domaine Λ (donc sur le domaine fluide Ω , les anodes, les cathodes, les isolants, le caisson ferromagnétique, etc.). En utilisant une méthode de Galerkin classique, la discrétisation spatiale du problème (2.26) est : trouver $V_h^{n+1} \in \mathcal{J}_h^n$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \sigma \vec{\nabla} V_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} W_h dx &= \int_{\Lambda} \sigma (\vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h) \cdot \vec{\nabla} W_h dx \\ &+ \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{in}|} \int_{\Gamma_{in}} W_h ds - \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{out}|} \int_{\Gamma_{out}} W_h ds \end{aligned} \quad (4.5)$$

pour tout $W_h \in \mathcal{J}_h^n$. En utilisant une base de Lagrange pour l'espace (4.1), le problème (4.5) peut être réécrit sous forme de système d'équations linéaires. Nous résolvons ce dernier par la méthode AMG ou la méthode du gradient conjugué. Une fois le potentiel V_h^{n+1} connu, la densité de courant \vec{j}_h^{n+1} est obtenue de manière directe par la relation

$$\vec{j}_h^{n+1} = \sigma \left(-\vec{\nabla} V_h^{n+1} + \vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h \right). \quad (4.6)$$

Notons que dans la formulation faible (4.5), la vitesse \vec{u}_h^n utilisée lors de l'intégration du terme $\sigma (\vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h)$ est le prolongement par $\vec{0}$ du champ de vitesse \vec{u}_h^n du maillage \mathcal{U}_h^n au maillage \mathcal{S}_h^n .

4.3 Equations de Navier-Stokes

Nous présentons maintenant la méthode utilisée pour la résolution des équations de Navier-Stokes stationnaires. Nous rappelons que l'écoulement des fluides est modélisé sur le domaine Ω et qu'en conséquence, la résolution des équations de Navier-Stokes est effectuée sur le maillage \mathcal{U}_h^n . Notons $\vec{j}_h^{n+1} \wedge \vec{B}_h$ l'approximation des forces des Lorentz au temps t_{n+1} , où \vec{j}_h^{n+1} est la densité de courant définie par (4.6). Soit encore f_l la fraction liquide définie par l'enthalpie H_h . En utilisant une méthode de Galerkin standard pour la discrétisation en espace et une méthode d'Euler semi-implicite pour la discrétisation temporelle, (2.12) devient : trouver $\vec{u}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h^n$ et $p_h^{n+1} \in \mathcal{Q}_h^n$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\vec{u}_h^{n+1} - \vec{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \vec{v}_h + 2\mu \varepsilon(\vec{u}_h^{n+1}) : \varepsilon(\vec{v}_h) + \rho(\vec{u}_h^n \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h - p_h^{n+1} \operatorname{div} \vec{v}_h \right) dx \\ \quad + \int_{\Omega} K_{\varepsilon} \vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h dx = \int_{\Omega} (\rho \vec{g} + \vec{j}_h^{n+1} \wedge \vec{B}_h) \cdot \vec{v}_h dx, \\ \int_{\Omega} q_h \operatorname{div} \vec{u}_h^{n+1} dx = 0 \end{array} \right. \quad (4.7)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n$ et tout $q_h \in \mathcal{Q}_h^n$, où \mathcal{V}_h^n et \mathcal{Q}_h^n sont les espaces définis par (4.2) et (4.3) respectivement.

Remarque 4.3.1. *Il n'est pas nécessaire d'ajouter des termes de stabilisation afin d'éliminer les modes de pression parasites dans le problème (4.7), les espaces \mathcal{V}_h^n et \mathcal{Q}_h^n satisfaisant la condition de compatibilité (voir par exemple [18] et [1]). Néanmoins, si le nombre de Reynolds est grand, une stabilisation du terme de convection doit être ajoutée au problème (4.7), cela pouvant être fait à l'aide d'une méthode de type SUPG par exemple. Dans notre situation, le nombre de Reynolds effectif obtenu avec le modèle de turbulence 4.3.1 est suffisamment faible pour utiliser le schéma (4.7) sans y ajouter une stabilisation du terme convectif.*

4.3.1 Modèle de viscosité turbulente

L'écoulement turbulent des fluides est d'une grande importance dans l'électrolyse. En effet, c'est cette turbulence qui répartit au mieux la chaleur dissipée par effet joule. Afin de tenir compte de ces effets dans nos simulations, nous utilisons un modèle de viscosité turbulente. Nous optons pour un modèle de longueur de mélange, qui peut facilement être pris en compte dans les équations de Navier-Stokes. Les modèles plus complexes, tels que le $k - \varepsilon$ (voir p.ex. [43, 35]) sont laissés de côté, car ils sont imprécis près des parois et nécessitent un maillage raffiné.

L'idée du modèle de longueur de mélange est de prendre une viscosité μ dépendant du champ de vitesse \vec{u} . Dans notre cas, nous optons pour un modèle inspiré de celui proposé par Smagorinsky en 1964. En notant μ_L la viscosité laminaire des fluides, nous prenons la viscosité μ définie par

$$\mu = \mu_L + \rho \alpha_t \left[2 \sum_{i,j=1}^3 (\varepsilon(\vec{u}))_{ij}^2 \right]^{1/2} \quad (4.8)$$

où ρ est la densité du fluide, $\varepsilon(\vec{u})$ le tenseur de déformation et $\alpha_t > 0$ un paramètre à calibrer. Notons que μ dépend des variations locales du champ de vitesse \vec{u} via le tenseur $\varepsilon(\vec{u})$. A la différence du modèle original de Smagorinsky, nous ne tenons pas compte des longueurs caractéristiques. En effet, les expérimentations numériques ont montré que le modèle (4.8) donne de meilleurs résultats que le modèle original de Smagorinsky.

4.3.2 Projection des forces

Afin d'augmenter la précision du schéma de résolution des équations de Navier-Stokes, nous ôtons de la densité de forces la contribution n'engendrant pas de mouvements. Pour ce faire, nous faisons appel au résultat suivant, tiré de [24] :

Théorème 4.3.2 (Décomposition de Helmholtz). *Soit $\vec{f} \in [L^2(\Omega)]^3$. Alors il existe $\psi \in H^1(\Omega)/\mathbb{R}$ et $\vec{\theta} \in [H^1(\Omega)]^3$ telles que*

$$\vec{f} = \text{rot } \vec{\theta} + \vec{\nabla} \psi$$

où ψ est l'unique solution du problème : Trouver $\psi \in H^1(\Omega)/\mathbb{R}$ telle que

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \eta dx = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\nabla} \eta dx$$

pour tout $\eta \in H^1(\Omega)/\mathbb{R}$ et $\vec{\theta}$ est tel que $\text{div } \vec{\theta} = 0$.

Autrement dit, tout champ de force \vec{f} peut être décomposé en une partie rotationnelle et une partie gradient. Le mouvement des fluides étant uniquement dû à la partie rotationnelle de $\rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$ (la partie gradient de $\rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$ influant uniquement sur la pression), nous ôtons la partie gradient de $\rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}$ lors des calculs numériques. Afin d'utiliser la décomposition de Helmholtz au temps t_{n+1} nous devons résoudre le problème suivant : Trouver $\psi_h^{n+1} \in \mathcal{Q}_h^n$ telle que

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \psi_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} q_h dx = \int_{\Omega} (\rho \vec{g} + \vec{j}_h^{n+1} \wedge \vec{B}_h) \cdot \vec{\nabla} q_h dx \quad \forall q_h \in \mathcal{Q}_h^n \quad (4.9)$$

où \mathcal{Q}_h^n est l'espace défini par (4.3). Notons encore que (4.9) n'est rien d'autre qu'une discrétisation standard par la méthode des éléments finis du problème apparaissant dans le Théorème 4.3.2, avec $\vec{f} = \rho \vec{g} + \vec{j}_h^{n+1} \wedge \vec{B}_h$.

Une fois la solution ψ_h^{n+1} du problème (4.9) connue, nous définissons le champ de force

$$\vec{F}_h^{n+1} = \rho \vec{g} + \vec{j}_h^{n+1} \wedge \vec{B}_h - \vec{\nabla} \psi_h^{n+1}$$

et nous utilisons ce champ de force lors de la résolution des équations de Navier-Stokes sur l'intervalle (t_n, t_{n+1}) . Avec cette modification, le problème (4.7) devient : Trouver $\vec{u}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h^n$, $\tilde{p}_h^{n+1} \in \mathcal{Q}_h^n$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\vec{u}_h^{n+1} - \vec{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \vec{v}_h + 2\mu \varepsilon(\vec{u}_h^{n+1}) : \varepsilon(\vec{v}_h) + \rho(\vec{u}_h^n \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h - \tilde{p}_h^{n+1} \text{div } \vec{v}_h \right) dx \\ \quad + \int_{\Omega} K_{\varepsilon} \vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h dx = \int_{\Omega} \vec{F}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h dx, \\ \int_{\Omega} q_h \text{div } \vec{u}_h^{n+1} dx = 0 \end{array} \right. \quad (4.10)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n$ et tout $q_h \in \mathcal{Q}_h^n$, où K_{ε} est la pénalisation de Carman-Kozeny (voir relation (2.5)). Notons encore que \tilde{p}_h^{n+1} ne représente pas la pression p_h^{n+1} , mais est liée à cette dernière par la relation

$$p_h^{n+1} = \tilde{p}_h^{n+1} + \psi_h^{n+1} + cste. \quad (4.11)$$

4.4 Interface libre

Nous présentons à présent les différents schémas numériques utilisés pour les calculs de l'interface libre. Après la présentation de la méthode des éléments finis utilisée pour transporter la fonction level-set φ , nous exposons le lissage de l'interface utilisé lors de nos simulations. Cette section se termine par l'algorithme de reconstruction de la fonction φ comme distance signée à l'interface aluminium-bain et l'approche utilisée pour conserver le volume d'aluminium.

4.4.1 Résolution de l'équation de transport

La forme faible du problème (2.14) est : pour presque tout $t > 0$, trouver $\varphi(t) \in H^1(\Omega)$ telle que

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varphi \psi dx + \int_{\Omega} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \psi dx = 0 \quad (4.12)$$

pour tout $\psi \in H^1(\Omega)$. Après discrétisation temporelle et spatiale par une méthode d'Euler implicite et une méthode des éléments finis standard, et en stabilisant le problème obtenu par une méthode de type SUPG (voir [21, 6]), la discrétisation de (4.12) est : trouver $\varphi_h^{n+1} \in \mathcal{R}_h^n$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\varphi_h^{n+1} - \varphi_h^n}{\Delta t} \psi_h dx &+ \int_{\Omega} (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \varphi_h^{n+1}) \psi_h dx \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \frac{\beta h_K}{2 \|\vec{u}_h^{n+1}\|_{L^2(K)}} \int_K (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \varphi_h^{n+1}) (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx = 0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

pour tout $\psi_h \in \mathcal{R}_h^n$, où $\beta > 0$ est un paramètre de stabilisation. Ainsi, comme φ_h^n est connu, φ_h^{n+1} s'obtient en résolvant le problème (4.13).

4.4.2 Lissage de l'interface

Soit φ_h^{n+1} la solution du problème (4.13) et soit $\Gamma^{n+1} = \{(x, y, z) \in \Omega : \varphi_h^{n+1}(x, y, z) = 0\}$ l'interface définie par la fonction φ_h^{n+1} . Lors de la résolution numérique de (4.13), des oscillations apparaissent sur l'interface Γ^{n+1} , comme illustré dans la FIGURE 4.1. Ces oscillations non physiques sont problématiques pour le calcul du potentiel et du courant. En effet, la forte différence de conductivité électrique entre le bain et l'aluminium a pour conséquence que le courant \vec{j} aura tendance à passer par les pointes plutôt que les creux de Γ^{n+1} , ce qui induit des surestimations et sous-estimations locales de la densité de courant \vec{j} . Afin de résoudre ce problème, nous nous basons sur la technique de lissage de l'interface par des moindres carrés développée dans [51]. L'interface restant fixe dans le domaine Ω_s , il est nécessaire d'adapter la méthode afin de lisser uniquement la partie liquide de l'interface, notée Γ_{liq}^{n+1} et définie par $\Gamma_{liq}^{n+1} = \Gamma^{n+1} \cap \Omega_{liq}$, où $\Omega_{liq} = \{\vec{x} \in \Omega : f_l(H_h(\vec{x})) > 0.5\}$.

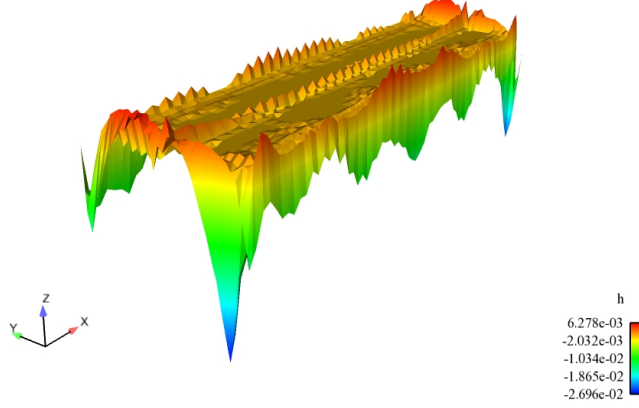


FIGURE 4.1 – Interface aluminium-bain non lissée. Nous constatons de nombreuses oscillations sur cette dernière.

Nous rappelons que Γ^{n+1} est le graphe d'une fonction lisse. Ainsi, il existe un domaine $\Pi \subset \mathbb{R}^2$ et une fonction $h^{n+1} : \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $\Gamma^{n+1} = \{(x, y, z) \in \Omega : z = h^{n+1}(x, y)\}$. Nous supposons que $\Gamma_{liq}^{n+1} = \Gamma^{n+1} \cap \Omega_{liq}$ est connu. Soit Π_{liq}^{n+1} l'ensemble des points v de Π tels que le couple $(v, g^{n+1}(v))$ est dans Γ_{liq}^{n+1} et $\Pi_s^{n+1} = \Pi \setminus \Pi_{liq}^{n+1}$. L'interface est lissée par la fonction $g^{n+1} : \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$g^{n+1}(x, y) = \begin{cases} s(x, y) & \forall (x, y) \in \Pi_{liq}^{n+1}, \\ h^{n+1}(x, y) & \forall (x, y) \in \Pi_s^{n+1}, \end{cases} \quad (4.14)$$

où s appartient à l'espace $\mathbb{Q}(m_x, m_y)$ des polynômes de degré m_x en x et de degré m_y en y défini par

$$\mathbb{Q}(m_x, m_y) = \text{span}\{x^i y^j : 0 \leq i \leq m_x, 0 \leq j \leq m_y, i, j \in \mathbb{N}\}. \quad (4.15)$$

En notant N le nombre de sommets de Γ_{liq}^{n+1} , le polynôme s de la relation (4.14) est choisi tel que

$$s = \underset{q \in \mathbb{Q}(m_x, m_y)}{\text{argmin}} \sum_{k=1}^N (h^{n+1}(x_k, y_k) - q(x_k, y_k))^2. \quad (4.16)$$

Définissons le polynôme $q_{ij}(x, y)$ par

$$q_{ij}(x, y) = P_i(x)P_j(y),$$

où $P_i(x)$ et $P_j(y)$ sont les polynômes de Legendre de degré i et j respectivement. Notons que la famille $(q_{ij})_{i,j=0}^{m_x, m_y}$ ainsi définie est une base de $\mathbb{Q}(m_x, m_y)$. Avec l'introduction de cette base, la recherche du polynôme s est équivalente à la recherche de coefficients $\alpha_{ij} \in \mathbb{R}$,

$0 \leq i \leq m_x, 0 \leq j \leq m_y$ tels que

$$s(x, y) = \sum_{i,j=0}^{m_x, m_y} \alpha_{ij} q_{ij}(x, y).$$

En notant

$$f(\alpha_{00}, \dots, \alpha_{m_x m_y}) = \sum_{k=1}^N \left(h^{n+1}(x_k, y_k) - \sum_{i,j=0}^{m_x, m_y} \alpha_{ij} q_{ij}(x_k, y_k) \right)^2,$$

la recherche de s revient à résoudre $\vec{\nabla} f = \vec{0}$, équation qui peut se réécrire comme

$$J^T J \vec{\alpha} = J^T \vec{\varphi}, \quad (4.17)$$

où les vecteurs $\vec{\alpha} \in \mathbb{R}^{(m_x+1)(m_y+1)}$ et $\vec{\varphi} \in \mathbb{R}^N$ sont définis par

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{00} \\ \vdots \\ \alpha_{m_x m_y} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{\varphi} = \begin{pmatrix} h^{n+1}(x_1, y_1) \\ \vdots \\ h^{n+1}(x_N, y_N) \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

et la matrice J par

$$J = \begin{pmatrix} q_{00}(x_1, y_1) & \cdots & q_{m_x m_y}(x_1, y_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{00}(x_N, y_N) & \cdots & q_{m_x m_y}(x_N, y_N) \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

La solution $\vec{\alpha}$ du problème (4.17) s'écrit alors

$$\vec{\alpha} = (J^T J)^{-1} J^T \vec{\varphi}. \quad (4.20)$$

La dimension de l'espace $\mathbb{Q}(m_x, m_y)$ étant petite ($m_x = 10$ et $m_y = 8$ dans la pratique), nous calculons $\vec{\alpha}$ de manière exacte en utilisant une décomposition LU de la matrice $J^T J$.

4.4.3 Traitement de l'interface dans les talus

Durant toute cette section, nous reprenons les notations de la section 4.4.2. Nous rappelons que l'introduction de la pénalisation de Carman-Kozeny dans les équations de Navier-Stokes entraîne que le champ de vitesse \vec{u} est nul dans le domaine solide Ω_s . Ceci a pour conséquence que l'interface Γ^{n+1} reste fixe dans Ω_s et qu'elle ne glisse pas le long des talus. Le lissage par des moindres carrés étant effectué uniquement sur les nœuds de Γ_{liq}^{n+1} , la relation (4.14) entraîne que g^{n+1} est discontinue sur le front de solidification. Nous présentons maintenant une méthode résolvant cette difficulté et permettant également à l'interface de glisser le long des talus.

L'approche choisie dans ce travail consiste à prolonger le polynôme $s : \Pi_{liq}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ obtenu par la méthode des moindres carrés en une fonction $\bar{g}^{n+1} : \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ avec \bar{g}^{n+1} continue. Les polynômes de Legendre étant définis pour tout $x \in \mathbb{R}$, la famille $(q_{ij})_{i,j=0}^{m_x, m_y}$ l'est également pour tout couple (x, y) de \mathbb{R}^2 . Comme les coefficients α_{ij} du polynôme s dans la base $(q_{ij})_{i,j=0}^{m_x, m_y}$ sont connus, une possibilité de prolongement consiste à prendre $\bar{g}^{n+1}(x, y) = s(x, y)$ pour tout $(x, y) \in \Pi$. Malgré sa simplicité, cette approche a pour inconvénient majeur que la déformation de l'interface n'est pas contrôlée dans le domaine Ω_s .

Avant de présenter le prolongement utilisé, nous introduisons la notion de *sommets voisins* : deux sommets v et w de Γ^{n+1} sont dit voisins si v et w sont des sommets du maillage de l'interface Γ^{n+1} et si v et w sont sur la même arête.

Nous supposons f_l connue pour tous les sommets de l'interface Γ^{n+1} . Notre approche consiste à prolonger la déformation de l'interface aux nœuds de $\Gamma_s^{n+1} = \Gamma^{n+1} \cap \Omega_s$ en leur attribuant la moyenne de la déformée de leur voisins se trouvant dans le domaine liquide. Plus précisément, la méthode utilisée est la suivante :

Initialisation

Soit S l'ensemble des sommets de Γ^{n+1} . Initialisons les fonctions auxiliaires \tilde{f}_l et $\tilde{g}(x, y)$ par $\tilde{f}_l(v) = f_l(v)$ pour tout $v \in S$ et $\tilde{g}(x, y) = g^{n+1}(x, y)$ pour tout $(x, y) \in \Pi$, où g^{n+1} est définie par la relation (4.14). Posons $S_l = \{v \in S : f_l(v) > 0.5\}$.

Algorithme

L'algorithme utilisé afin de prolonger s de Π_{liq}^{n+1} à Π est alors : tant que $S_l \neq S$,

1. Trouver l'ensemble F des sommets v de Γ^{n+1} tels que

- (a) $\tilde{f}_l(v) \leq 0.5$,

- (b) Il existe au moins un voisin w de v tel que $\tilde{f}_l(w) > 0.5$.

Remarquons que F correspond aux nœuds de l'interface se trouvant sur le front de solidification défini par la fonction \tilde{f}_l .

2. Pour tout $v \in F$, poser $N(v) = \{w \in S : \tilde{f}_l(w) > 0.5 \text{ et } w \text{ est un voisin de } v\}$.

Notons que $N(v)$ est l'ensemble des voisins w de v se trouvant dans le domaine liquide défini par la fonction auxiliaire \tilde{f}_l .

3. Pour tout $v = (x, y, z) \in F$, prolonger la déformée de l'interface par

$$\tilde{g}(x, y) = \frac{1}{\text{Card}(N(v))} \sum_{w \in N(v)} \tilde{g}(x_w, y_w),$$

où x_w, y_w sont les deux premières coordonnées du voisin w de v .

4. Pour tout $v \in F$, poser $\tilde{f}_l(v) = 1.0$ (i.e. $S_l \leftarrow S_l \cup F$) et retourner au point 1.

Dès que $S_l = S$ dans l'algorithme ci-dessus, nous posons $\bar{g}^{n+1}(x, y) = \tilde{g}(x, y) \forall (x, y) \in \Pi$. Notons que \bar{g}^{n+1} est bien un prolongement de la fonction p du domaine Π_{liq}^{n+1} au domaine Π et que \bar{g}^{n+1} est une fonction lisse.

4.4.4 Reconstruction de la distance signée

Afin de garder de la précision lors de la recherche des zéros de la fonction level-set φ , nous désirons que φ soit une distance signée. En effet, si $\|\vec{\nabla}\varphi\| \approx 0$, la recherche des zéros de φ est un problème mal conditionné car de petites perturbations sur φ induisent de grandes variations de la 0-surface de niveau de φ . Or, si φ est une distance signée, $\|\vec{\nabla}\varphi\| = 1$ et donc la recherche des zéros de φ est un problème bien conditionné. Malheureusement, même si la condition initiale de φ est une distance signée, φ ne conservera pas cette propriété lors de l'évolution temporelle. Une réinitialisation périodique de φ comme distance à l'interface est donc nécessaire.

Soit $\varepsilon > 0$ un paramètre et $S_\varepsilon(\varphi_h^{n+1})$ une approximation du signe de la fonction φ_h^{n+1} définie par

$$S_\varepsilon(\varphi_h^{n+1}) = \frac{\varphi_h^{n+1}}{\sqrt{(\varphi_h^{n+1})^2 + \varepsilon}}.$$

Une approche pour reconstruire φ_h^{n+1} comme distance signée à l'interface est proposée par S. Osher dans [52]. Il suffit de calculer la solution stationnaire du problème : Trouver $\psi : (0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + S_\varepsilon(\varphi_h^{n+1})(1 - \|\vec{\nabla}\psi\|) = 0, \\ \psi(\vec{x}, 0) = \varphi_h^{n+1}(\vec{x}). \end{cases} \quad (4.21)$$

Ainsi, la solution stationnaire de (4.21) satisfait $\|\vec{\nabla}\psi\| = 1$ et la 0-surface de niveau n'a pas été déplacée. Bien que cette approche soit séduisante, elle est difficile à mettre en œuvre dans notre cas. En effet, en notant Γ_{liss}^{n+1} l'interface Γ^{n+1} lissée par la méthode 4.4.2 et prolongée au domaine Ω_s comme expliqué dans la section 4.4.3, Γ_{liss}^{n+1} est une approximation de la 0-surface de niveau de φ_h^{n+1} qui ne correspond plus à l'ensemble des zéros de φ_h^{n+1} . Afin de corriger ce défaut, nous allons redéfinir explicitement φ_h^{n+1} comme distance signée à l'interface Γ_{liss}^{n+1} .

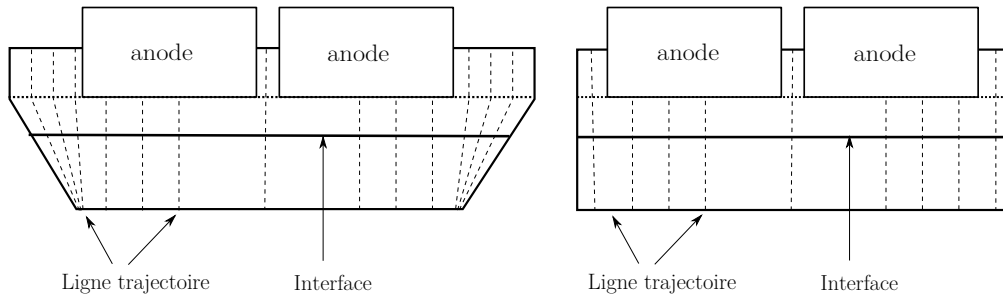


FIGURE 4.2 – Lignes trajectoires. La ligne horizontale en traits-tillés représente le plan anodique.

Avant de présenter l'algorithme de reconstruction à une distance signée, il est nécessaire d'introduire *les lignes trajectoires*. Une ligne trajectoire est une droite brisée virtuelle qui est toujours verticale en dessus du plan anodique et verticale ou inclinée en dessous du plan anodique, suivant que le bord de la cuve est incliné ou non. Plus précisément, si le bord de la cuve est incliné, celles-ci sont verticales sous les anodes et entre les anodes, et inclinées sinon. Si le bord de la cuve est droit, toutes les lignes trajectoires sont verticales. Une illustration des celles-ci se trouve dans la FIGURE 4.2.

Nous pouvons dès lors présenter la méthode utilisée afin de reconstruire φ_h^{n+1} comme distance à l'interface Γ_{liss}^{n+1} . Celle-ci est la suivante : si $v = (x, y, z)$ est un sommet du maillage, trouver l'intersection $v_\Gamma = (x_\Gamma, y_\Gamma, z_\Gamma)$ de la ligne trajectoire de v et de l'interface Γ_{liss}^{n+1} et définir $\varphi_h^{n+1}(v)$ par

$$\varphi_h^{n+1}(v) = \begin{cases} d(v, v_\Gamma) & \text{si } z \geq z_\Gamma, \\ -d(v, v_\Gamma) & \text{si } z < z_\Gamma. \end{cases} \quad (4.22)$$

où $d(x, y)$ est la distance euclidienne entre les points x et y .

Mentionnons encore que cette méthode doit être appliquée à chaque pas de temps, car le lissage de l'interface l'est. En effet, lorsque nous lisons Γ^{n+1} par des moindres carrés, nous déplaçons légèrement celle-ci, ce qui a pour conséquence que l'interface lissée ne correspond plus à l'ensemble des zéros de la fonction level-set φ_h^{n+1} obtenue par la résolution du problème (4.13). Afin de conserver la propriété $\Gamma^{n+1} = \{(x, y, z) \in \Omega : \varphi_h^{n+1}(x, y, z) = 0\}$, il est alors indispensable de reconstruire φ_h^{n+1} comme distance signée à l'interface lissée à chaque pas de temps.

4.4.5 Conservation du volume

Il est bien connu que la méthode du level-set ne conserve pas le volume, contrairement à d'autres approches, comme par exemple la méthode *Volume of Fluid* [27]. Nous présentons une méthode permettant de pallier à ce défaut. Soit V_0 le volume d'aluminium initialement contenu dans la cuve d'électrolyse et soit φ_h^{n+1} définie par (4.22). L'algorithme utilisé afin de conserver le volume est le suivant

- **Initialisation** Poser $k = 1$, $\varphi^1 = \varphi_h^{n+1}$.
- **Algorithme** Pour $k = 1, \dots, N$, faire
 1. Calculer le volume d'aluminium V_k entre le plan cathodique et l'interface Γ^k définie par la fonction level-set φ^k .
 2. Calculer $\delta^k = \frac{V_k - V_0}{|\Gamma^k|}$, où $|\Gamma^k|$ est l'aire de l'interface Γ^k .
 3. Poser $\varphi^{k+1} = \varphi^k + \delta^k$.

Une fois les étapes ci-dessus effectuées, nous posons $\varphi_h^{n+1} = \varphi^{N+1}$. Lors de nos simulations numériques, il a été observé que $\delta^2 \sim 10^{-6} - 10^{-7}[m]$, ce qui a pour conséquence que la fonction level-set n'est quasiment plus modifiée après la deuxième itération de l'algorithme ci-dessus. En conséquence, nous prendrons $N = 2$ lors de nos calculs.

4.5 Interpolation

Soit \mathcal{T}_h un maillage de la cuve d'électrolyse Λ et soit \mathcal{S}_h^n le maillage de la cuve conforme à la position de l'interface Γ^n obtenu par le raffinement du maillage \mathcal{T}_h décrit au chapitre 3. Les calculs de l'itération n de la MHD se faisant sur \mathcal{S}_h^n , il est nécessaire d'interpoler \vec{u}_h^n et φ_h^n sur le maillage \mathcal{S}_h^n .

Soit K un tétraèdre de sommets w_1, w_2, w_3, w_4 et soit $v \in K$. Soit encore $f : K \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction. Comme $v \in K$, $v = \sum_{i=1}^4 \lambda_i w_i$ où λ_i , $i = 1, 2, 3, 4$ sont les coordonnées barycentriques de v dans K . L'interpolation linéaire Πf de f au point v est définie par

$$\Pi f(v) = \sum_{i=1}^4 \lambda_i f(w_i). \quad (4.23)$$

Notons encore que la formule (4.23) est exacte si la fonction f est linéaire. Soit v un sommet de \mathcal{S}_h^n . Une première approche pour interpoler \vec{u}_h^n et φ_h^n au point v est la suivante : trouver un tétraèdre K de \mathcal{S}_h^{n-1} tel que $v \in K$ et interpoler les champs \vec{u}_h^n et φ_h^n au sommet v en utilisant la relation (4.23). Cette approche, bien que très simple à implémenter, est très coûteuse en temps CPU.

Afin de réduire le coût de l'interpolation, nous cherchons un tétraèdre $K \in \mathcal{T}_h$ tel que $v \in K$, puis nous appliquons (4.23). Nous faisons ceci de manière efficace en utilisant une propriété de la subdivision des tétraèdres décrite au chapitre 3. En effet, lorsqu'un sommet est ajouté par la découpe, nous savons dans quel tétraèdre du maillage \mathcal{T}_h il se trouve. Ainsi, lors du partage des tétraèdres décrit à la section 3.3.1, nous conservons les informations suivantes pour chaque sommet v de \mathcal{S}_h^n : le tétraèdre $K \in \mathcal{T}_h$ dans lequel se trouve v et les coordonnées barycentriques de v dans K . Ainsi, après le raffinement du maillage, pour chaque sommet v de \mathcal{S}_h^n , nous connaissons

- Un tétraèdre $K \in \mathcal{T}_h$ tel que $v \in K$,
- Les coordonnées barycentriques de v dans K ,

ce qui entraîne que l'interpolation d'une fonction f du maillage \mathcal{T}_h au maillage \mathcal{S}_h^n est immédiate en utilisant la relation (4.23).

4.6 Algorithme évolutif sur maillage fixe

Maintenant que les schémas numériques ont été présentés, il est possible d'exposer l'algorithme de résolution du problème MHD avec interface libre. Soit \mathcal{T}_h la triangulation initiale de la cuve d'électrolyse. \mathcal{T}_h contient donc les fluides, les anodes, la cathode, les barres cathodiques, les isolants, etc. Soit encore Σ_h le sous-maillage de \mathcal{T}_h correspondant au domaine occupé par les anodes et le domaine Ω . Nous supposons également connue la fonction level-set initiale φ_h^0 correspondant à l'interface initiale Γ^0 , tout comme le champ de vitesse initial \vec{u}_h^0 . Pour la découpe des anodes, nous prenons comme fonction initiale $\Psi_h^0 = \varphi_h^0 - ACD$ (voir section 3.4.1). Nous supposons également qu'une approximation \vec{B}_h du champ d'induction est connue sur \mathcal{T}_h , tout comme une approximation H_h de l'enthalpie.

Algorithme MHD sur maillage fixe

En notant \vec{u}_h^n , φ_h^n , et Ψ_h^n des approximations du champ de vitesse, de la fonction level-set, et de la fonction de découpe des anodes au temps t_n , l'algorithme de la MHD sur maillage fixe est le suivant : Pour $n = 0, \dots, N$,

1. Raffiner le maillage \mathcal{T}_h par rapport à la fonction Ψ_h^n selon la méthode présentée dans la section 3.4.1 afin d'obtenir un maillage conforme à la déformation des anodes. Notons \mathcal{T}_{temp}^n le maillage obtenu.
2. Interpoler \vec{u}_h^n , \vec{B}_h , H_h et φ_h^n du maillage \mathcal{T}_h au maillage \mathcal{T}_{temp}^n en utilisant l'algorithme présenté à la section 4.5.
3. Raffiner \mathcal{T}_{temp}^n par rapport à la fonction level-set φ_h^n avec la méthode présentée dans la section 3.3.1. Nous obtenons ainsi le maillage \mathcal{S}_h^n et l'interface Γ^n .
4. Interpoler la vitesse \vec{u}_h^n , la fonction level-set φ_h^n , l'induction \vec{B}_h et l'enthalpie H_h du maillage \mathcal{T}_{temp}^n au maillage \mathcal{S}_h^n avec la méthode de la section 4.5,
5. Imposer les conditions de bord des différents problèmes, à savoir :
 - Potentiel électrique (Imposition de la densité de courant sur les surfaces d'entrée et de sortie du courant, calcul des conductivités électriques et imposition de la valeur du potentiel en un point),
 - Hydrodynamique,
 - Transport de la fonction level-set,
6. Calculer le courant \vec{j}_h^{n+1} avec le schéma (4.5) et la formule (4.6),
7. Ôter la partie gradient du champ de forces avec le schéma (4.9),
8. Résoudre les équations de Navier-Stokes sur l'intervalle (t_n, t_{n+1}) au moyen du schéma (4.10),
9. Calculer φ_h^{n+1} avec le schéma (4.13).
10. Lisser l'interface Γ^{n+1} définie par la fonction φ_h^{n+1} avec la méthode de la section 4.4.2 puis étendre la déformation de Γ_{liq}^{n+1} avec la méthode présentée dans 4.4.3. Notons $\bar{\Gamma}^{n+1}$ l'interface lissée et prolongée.
11. Pour chaque sommet v de maillage Σ_h , redéfinir φ_h^{n+1} comme distance signée à $\bar{\Gamma}^{n+1}$ au moyen de la relation (4.22).
12. Appliquer l'algorithme de conservation du volume de la section 4.4.5 sur le domaine Σ_h . Notons Γ^{n+1} et φ_h^{n+1} l'interface et la fonction level-set à l'issue de l'algorithme du paragraphe 4.4.5.
13. Pour tous les sommets de Σ_h , mettre à jour la déformation des anodes en définissant $\Psi_h^{n+1} = \varphi_h^{n+1} - ACD$, où ACD est la distance verticale entre les anodes et l'interface définie au paragraphe 3.4.1.
14. Pour les nœuds de \mathcal{T}_h se trouvant dans $\mathcal{T}_h \setminus \Sigma_h$, poser $\varphi_h^{n+1} \equiv \Psi_h^{n+1} \equiv 0$.
15. Restreindre les champs \vec{u}_h^{n+1} , φ_h^{n+1} et Ψ_h^{n+1} du maillage \mathcal{S}_h^n à la triangulation \mathcal{T}_h .
16. Effacer tout ce qui est lié à \mathcal{T}_{temp}^n , \mathcal{S}_h^n et \mathcal{U}_h^n .

4.7 Conclusions

Les différents schémas utilisés par l'algorithme de marche temporelle combiné avec une approche eulérienne ont été présentés, ainsi que la méthode utilisée pour calculer l'évolution temporelle de l'interface. Nous avons également développé une méthode permettant de déplacer artificiellement l'interface dans les régions solidifiées. En particulier, celle-ci permet à l'interface Γ de glisser le long des talus. L'efficacité de cette méthode sera montrée dans le chapitre 7.

Notons que la méthode décrite à la section 4.6 peut également être appliquée lorsque le domaine Ω_s est vide et lorsqu'il n'y pas d'isolants autour des fluides. Dans ce cas l'algorithme de la section 4.6 doit donner les mêmes résultats que l'approche lagrangienne utilisée dans le logiciel *ALUCCELL*. Remarquons encore que la méthode 4.6 peut être utilisée afin d'étudier l'évolution temporelle des phénomènes MHD avec interface libre, bien que nous l'utilisions principalement pour calculer des interfaces aluminium-bain stationnaires.

Chapitre 5

Conservation de l'énergie

Ce chapitre a pour but de présenter une méthode permettant de conserver numériquement l'énergie lorsqu'elle est appliquée à un problème de convection-diffusion évolutif en temps avec des conditions aux limites de Robin. L'idée de cette méthode a été donnée par [28] lorsqu'on a des conditions adiabatiques au bord du domaine. Dans ce chapitre, nous reprenons l'idée décrite dans [20] (article à paraître dans la revue M2AN), ainsi que les résultats et une partie de la théorie présentés dans cette publication.

Après une brève introduction, nous présentons des lois de conservation satisfaites par la forme variationnelle du problème de convection-diffusion, puis nous montrons que ces lois de conservation ne sont plus vérifiées lorsque la forme variationnelle est discrétisée en espace. Nous présentons ensuite une méthode permettant de conserver numériquement les propriétés désirées. Nous terminons cette partie en montrant numériquement que notre nouveau schéma satisfait les propriétés demandées.

5.1 Introduction

Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ un domaine borné de bord $\partial\Lambda$ Lipschitz. Notons encore $\vec{n} : \partial\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^3$ le champ de normales unitaires à $\partial\Lambda$. Nous supposons qu'un fluide incompressible s'écoule dans le domaine Λ avec une vitesse \vec{u} dépendante de la position \vec{x} et du temps t tandis qu'une fonction φ est diffusée et transportée. Afin de simplifier l'exposé, le champ de vitesse \vec{u} est supposé stationnaire et tel que

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial\Lambda \text{ et } \operatorname{div} \vec{u} = 0 \text{ dans } \Lambda. \quad (5.1)$$

Soient encore $T > 0$ le temps final, $\alpha > 0$ le coefficient d'échange thermique et κ le coefficient de diffusion. Nous considérons le problème : trouver $\varphi : (0, T) \times \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa \vec{\nabla} \varphi) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) = f & \text{dans } \Lambda \\ \kappa \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = \alpha(\varphi_r - \varphi) & \text{sur } \partial\Lambda \end{cases} \quad (5.2)$$

avec $\varphi(0) = \varphi_0$ comme condition initiale. Dans le problème (5.2), f est un terme source qui dépend du temps $t \in (0, T)$ et de $\vec{x} \in \Lambda$ et φ_r est un nombre réel positif donné. En

utilisant les notations standards pour les espaces de Sobolev (voir [15]) et en supposant que $f \in L^2((0, T) \times \Lambda)$, que $\varphi_r \in L^2(\Lambda)$ et que $\vec{u} \in H^1(\Lambda)^3$, la formulation faible du problème (5.2) est alors : trouver $\varphi \in L^2((0, T) : H^1(\Lambda)) \cap C^0((0, T) : L^2(\Lambda))$ telle que

$$\int_{\Lambda} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \psi + \kappa \vec{\nabla} \varphi \cdot \vec{\nabla} \psi + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \psi \right) dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi \psi ds = \int_{\Lambda} f \psi dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_r \psi ds \quad (5.3)$$

pour tout $\psi \in H^1(\Lambda)$.

Conservation de l'énergie En prenant la fonction test $\psi \equiv 1$ dans (5.3), nous obtenons

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} \varphi dx + \int_{\Lambda} \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi dx = \int_{\Lambda} f dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha (\varphi_r - \varphi) ds. \quad (5.4)$$

En utilisant (5.1) et le théorème de la divergence,

$$\int_{\Lambda} \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi dx = \int_{\Lambda} \operatorname{div}(\vec{u} \varphi) dx = \int_{\partial \Lambda} \varphi (\vec{u} \cdot \vec{n}) ds = 0.$$

En insérant cela dans (5.4), nous obtenons la relation de *conservation de l'énergie* :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} \varphi dx = \int_{\Lambda} f dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha (\varphi_r - \varphi) ds. \quad (5.5)$$

Cette propriété est importante, car elle décrit la conservation de l'énergie si φ représente une température, ou la conservation de la masse si φ représente une concentration.

Stabilité indépendante du terme de convection Notons $\|v\|$ la norme L^2 de la fonction $v \in L^2(\Lambda)$ et

$$\|v\|_1 = \left(\int_{\Lambda} k |\vec{\nabla} \varphi|^2 dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi^2 ds \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Sous l'hypothèse (5.1), $(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \varphi = \frac{1}{2} \operatorname{div}(\vec{u} \varphi^2)$. En remplaçant ψ par φ dans (5.3) et en faisant un raisonnement analogue à celui utilisé pour la dérivation de (5.5), nous obtenons

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\varphi\|^2 + \|\varphi\|_1^2 = \int_{\Lambda} f \varphi dx.$$

En prenant $\lambda_1 = \inf_{v \in H^1(\Lambda)} \frac{\|v\|_1^2}{\|v\|^2}$ et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, nous obtenons

$$\frac{d}{dt} \|\varphi\| + \lambda_1 \|\varphi\| \leq \|f\|, \quad (5.6)$$

qui est une propriété de stabilité. En particulier, si $\alpha > 0$, alors $\|\cdot\|_1$ est une norme équivalente à la norme H^1 et λ_1 est strictement positif. Si de plus $f \equiv 0$, la fonction φ décroît de manière exponentielle et $\|\varphi\| \leq e^{-\lambda_1 t} \|\varphi_0\|$.

Conservation de la solution constante

Si $f \equiv 0$ et $\alpha \equiv 0$, alors $\varphi = \text{constante}$ est une solution stationnaire. (5.7)

Dans le cadre de notre travail, nous aimerions définir une semi-discrétisation en espace de (5.3) (en prenant un espace $\mathcal{J}_h \subset H^1(\Lambda)$) permettant de calculer une approximation φ_h de φ telle que :

Propriété 1h : conservation de l'énergie

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} \varphi_h dx = \int_{\Lambda} f dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha(\varphi_r - \varphi_h) ds. \quad (5.8)$$

Propriété 2h : L^2 -stabilité du schéma

$$\frac{d}{dt} \|\varphi_h\| + \lambda_{1h} \|\varphi_h\| \leq \|f\| \quad (5.9)$$

où $\lambda_{1h} = \inf_{v_h \in \mathcal{J}_h} \frac{\|v_h\|_1^2}{\|v_h\|^2}$. Notons encore que dans une méthode éléments finis standard, nous avons $\lambda_{1h} \geq \lambda_1$ (voir [2] p. 699) et donc

$$\frac{d}{dt} \|\varphi_h\| + \lambda_1 \|\varphi_h\| \leq \|f\|. \quad (5.10)$$

Propriété 3h : conservation de la solution constante

Si $f \equiv 0$ et $\alpha \equiv 0$, alors $\varphi_h = \text{constante}$ est une solution stationnaire. (5.11)

5.1.1 Discrétisation en espace et propriétés de conservation

Soit \mathcal{S}_h un maillage en tétraèdres du domaine Λ et soit l'espace éléments finis \mathcal{J}_h défini par $\mathcal{J}_h = \{u \in C^0(\Lambda) : u|_K \in \mathbb{P}^1(K) \text{ pour tout } K \in \mathcal{S}_h\}$. Nous supposons également connue une approximation \vec{u}_h du champ de vitesse \vec{u} . La semi-discrétisation en espace du problème (5.3) est alors : trouver $\varphi_h \in H^1((0, T) : \mathcal{J}_h)$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t} \psi_h + \kappa \vec{\nabla} \varphi_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h + (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h) \psi_h \right) dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_h \psi_h ds \\ = \int_{\Lambda} f \psi_h dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r \psi_h ds \end{aligned} \quad (5.12)$$

pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$ avec la condition initiale $\varphi_h(0) = \varphi_h^0$, où φ_h^0 est une approximation de φ_0 . Généralement, l'approximation \vec{u}_h du champ de vitesse \vec{u} utilisée dans (5.12) n'est pas exactement à divergence nulle, mais satisfait $\|\operatorname{div} \vec{u}_h\| \leq Ch$ ou $C > 0$ est une constante indépendante de h . Ainsi, dans la suite de ce document, nous supposons que

$$\operatorname{div} \vec{u}_h \neq 0 \text{ dans } \Lambda, \quad \|\operatorname{div} \vec{u}_h\| \leq Ch \text{ et } \vec{u}_h \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial\Lambda. \quad (5.13)$$

Remarque 5.1.1. Les hypothèses (5.13) sont vérifiées si le champ de vitesse \vec{u}_h est obtenu par un solveur Navier-Stokes stationnaire de type $\mathbb{P}^1 - \mathbb{P}^1$ stabilisé ou de type \mathbb{P}^1 bulle - \mathbb{P}^1 et si la solution \vec{u} est régulière.

Etudions à présent la conservation de l'énergie, la stabilité L^2 et la conservation de la solution constante pour le schéma (5.12) lorsque les hypothèses (5.13) sont vérifiées. En prenant $\psi_h \equiv 1$ dans (5.12), nous obtenons

$$\frac{d}{dt} \int_{\Lambda} \varphi_h dx + \int_{\Lambda} \vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h dx = \int_{\Lambda} f dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha(\varphi_r - \varphi_h) ds. \quad (5.14)$$

Comme $\int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h) dx = - \int_{\Lambda} \operatorname{div}(\vec{u}_h) \varphi_h dx$ par le théorème de la divergence et que $\operatorname{div} \vec{u}_h \neq 0$, nous avons que $\int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h) dx \neq 0$. Ainsi, l'énergie n'est pas conservée au sens de (5.5), lorsque les hypothèses (5.13) sont vérifiées. Etudions maintenant la stabilité L^2 du schéma (5.12). En prenant $\psi_h = \varphi_h$ dans (5.12), nous obtenons

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\varphi_h\|^2 + \|\varphi_h\|_1^2 + \frac{1}{2} \int_{\Lambda} \vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h^2 dx = \int_{\Lambda} f \varphi_h dx. \quad (5.15)$$

Comme $\int_{\Lambda} \vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h^2 dx = - \int_{\Lambda} \operatorname{div}(\vec{u}_h) \varphi_h^2 dx$ par le théorème de la divergence et que $\operatorname{div} \vec{u}_h \neq 0$, nous avons que $\int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h^2) dx \not\geq 0$. Nous n'avons donc pas de stabilité indépendante du terme convectif, au sens de la relation (5.9). Néanmoins, si $f \equiv 0$, et $\alpha \equiv 0$, alors $\varphi_h = \text{constante}$ est une solution stationnaire.

5.1.2 Autres approximations du terme convectif

Nous avons constaté que la discrétisation $\int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h) \psi_h dx$ du terme convectif ne permet pas d'obtenir les propriétés (5.8), (5.9) et (5.11) simultanément. Afin de pallier à ce défaut, une stratégie consiste à utiliser une autre expression du terme convectif que nous noterons $L(\vec{u}, \varphi, \psi)$ et telle que

1. $L(\vec{u}, \varphi, \psi)$ soit consistante, i.e. $\int_{\Lambda} L(\vec{u}, \varphi, \psi) dx = \int_{\Lambda} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \psi dx$ pour tout $\varphi, \psi \in H^1(\Lambda)$,
2. $\int_{\Lambda} L(\vec{u}_h, \psi_h, 1) dx = 0$ pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$ afin de satisfaire (5.8),
3. $\int_{\Lambda} L(\vec{u}_h, \psi_h, \psi_h) dx = 0$ pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$ afin de satisfaire (5.9),
4. $\int_{\Lambda} L(\vec{u}_h, 1, \psi_h) dx = 0$ pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$ afin de satisfaire (5.11).

Les expressions usuelles de $L(\vec{u}, \varphi, \psi)$ sont les suivantes

$$(L1) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \psi,$$

$$(L2) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = -(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \psi) \varphi,$$

$$(L3) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = \operatorname{div}(\vec{u}\varphi)\psi,$$

$$(L4) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = \frac{1}{2} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi)\psi - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \psi)\varphi \right].$$

Néanmoins, aucune des expressions (L1) à (L4) ne satisfait simultanément les relations 2, 3 et 4 lorsque $\operatorname{div} \vec{u}_h$ n'est pas identiquement nulle. Ainsi, les propriétés 1h, 2h et 3h ne peuvent être vérifiées conjointement, comme illustré dans la TABLE 5.1.

$L(\vec{u}_h, \varphi_h, \psi_h)$	Propriété 1h	Propriété 2h	Propriété 3h
L1	non	non	oui
L2	oui	non	non
L3	oui	non	non
L4	non	oui	non
L5	oui	oui	oui
L6	oui	non	oui

TABLE 5.1 – Conservation des propriétés 1h, 2h et 3h pour différentes expressions du terme convectif lorsque $\operatorname{div} \vec{u}_h \neq 0$.

En notant $\bar{\omega} = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \omega dx$ la moyenne la fonction ω sur le domaine Λ , nous proposons l'expression suivante :

$$(L5) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = \frac{1}{2} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi)(\psi - \bar{\psi}) - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \psi)(\varphi - \bar{\varphi}) \right].$$

Il est possible de montrer que les propriétés 1, 2, 3 et 4 sont satisfaites par la discrétisation (L5). Ainsi, les propriétés 1h, 2h et 3h sont vérifiées simultanément en prenant l'expression (L5), comme illustré dans la TABLE 5.1. Néanmoins, dans les simulations numériques du processus de Hall-Hérault, le schéma (L5) converge difficilement vers une solution stationnaire. Afin de faciliter la convergence, nous utilisons une variante du schéma (L5), notée (L6), et définie par

$$(L6) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi)(\psi - \bar{\psi}).$$

Nous pouvons démontrer que le schéma (L6) conserve l'énergie et la solution constante, mais qu'il n'est pas L^2 -stable si la divergence du champ de vitesse \vec{u} est non nulle. Les expérimentations numériques ont montré que le schéma (L6) converge plus rapidement vers une solution stationnaire que le schéma (L5) lorsque celui-ci est appliqué aux simulations numériques du processus de Hall-Hérault. En conséquence, nous utilisons le schéma (L6) dans notre travail.

5.2 Discrétisation du schéma conservatif

En remplaçant $\int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h) \psi_h dx$ par $\int_{\Lambda} L(\vec{u}_h, \varphi_h, \psi_h) dx$ dans le schéma (5.12), avec $L(\vec{u}_h, \varphi_h, \psi_h)$ défini par (L5), le schéma (5.12) devient : trouver $\varphi_h \in H^1((0, T) : \mathcal{J}_h)$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t} \psi_h + \kappa \vec{\nabla} \varphi_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h + \frac{1}{2} [(\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h)(\psi_h - \bar{\psi}_h) - (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h)(\varphi_h - \bar{\varphi}_h)] \right) dx \\ + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_h \psi_h ds = \int_{\Lambda} f \psi_h dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_r \psi_h ds \end{aligned} \quad (5.16)$$

pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$. D'un point de vue numérique, il n'est pas pratique de travailler avec le schéma (5.16) lorsqu'on utilise une méthode des éléments finis. En effet, le support de $\psi_h - \bar{\psi}_h$ est le domaine Λ et cela a pour conséquence que la matrice obtenue par le schéma (5.16) est pleine. Soit $\tilde{\mathcal{J}}_h = \{u \in \mathcal{J}_h : \int_{\Lambda} u dx = 0\}$ et considérons la partition suivante : $\mathcal{J}_h = \tilde{\mathcal{J}}_h \oplus \mathbb{R}$. Ainsi, tout $v \in \mathcal{J}_h$ s'écrit de la forme $v = \tilde{v} + \bar{v}$ avec $\bar{v} = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} v dx$ et $\tilde{v} = v - \bar{v}$. Considérons maintenant le problème : trouver $\tilde{\varphi}_h \in H^1((0, T) : \tilde{\mathcal{J}}_h)$, $\bar{\varphi}_h \in H^1((0, T) : \mathbb{R})$ telles que

$$\left\{ \begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}_h}{\partial t} \tilde{\psi}_h + \kappa \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_h \cdot \vec{\nabla} \tilde{\psi}_h \right) + \frac{1}{2} \int_{\Lambda} [(\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_h) \tilde{\psi}_h - (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \tilde{\psi}_h) \tilde{\varphi}_h] dx \\ + \int_{\partial \Lambda} \alpha (\tilde{\varphi}_h + \bar{\varphi}_h) \tilde{\psi}_h ds = \int_{\Lambda} f \tilde{\psi}_h dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_r \tilde{\psi}_h ds \\ \frac{d}{dt} \int_{\Lambda} (\tilde{\varphi}_h + \bar{\varphi}_h) dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha (\tilde{\varphi}_h + \bar{\varphi}_h) ds = \int_{\Lambda} f dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_r ds \end{aligned} \right. \quad (5.17)$$

pour tout $\tilde{\psi}_h \in \tilde{\mathcal{J}}_h$, avec les conditions initiales $\tilde{\varphi}_h(0) = \tilde{\varphi}_h^0 = \varphi_h^0 - \bar{\varphi}_h^0$, où φ_h^0 est une approximation de φ_0 et $\bar{\varphi}_h^0(0) = \bar{\varphi}_h^0 = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \varphi_h^0 dx$. En prenant consécutivement $\psi_h \in \tilde{\mathcal{J}}_h$ et $\psi_h \equiv 1$, nous pouvons facilement montrer que les schémas (5.16) et (5.17) sont équivalents.

Dans (5.17), la moyenne des fonctions tests $\tilde{\psi}_h$ est nulle, ce qui n'est pas usuel dans la méthode des éléments finis. Cette contrainte est imposée à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange λ et d'une équation supplémentaire forçant la moyenne de $\tilde{\varphi}_h$ à être nulle. Nous cherchons donc $\tilde{\varphi}_h \in H^1((0, T) : \tilde{\mathcal{J}}_h)$, $\bar{\varphi}_h \in H^1((0, T) : \mathbb{R})$ et $\lambda \in H^1((0, T) : \mathbb{R})$ tels que

$$\left\{ \begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}_h}{\partial t} \psi_h + \kappa \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h + \frac{1}{2} [(\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_h) \psi_h - (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h) \tilde{\varphi}_h] \right) dx \\ + \int_{\partial \Lambda} \alpha (\tilde{\varphi}_h + \bar{\varphi}_h) \psi_h ds + \lambda \int_{\Lambda} \psi_h dx = \int_{\Lambda} f \psi_h dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_r \psi_h ds \\ \int_{\Lambda} \frac{\partial \bar{\varphi}_h}{\partial t} dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \tilde{\varphi}_h ds + \bar{\varphi}_h \int_{\partial \Lambda} \alpha ds = \int_{\Lambda} f dx + \int_{\partial \Lambda} \alpha \varphi_r ds \\ \int_{\Lambda} \tilde{\varphi}_h dx = 0 \end{aligned} \right. \quad (5.18)$$

pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$. Notons que les problèmes (5.17) et (5.18) sont équivalents, mais qu'il est plus pratique de travailler avec le schéma (5.18). En conséquence, nous utilisons ce dernier pour nos simulations numériques.

Soit $N > 0$, $\Delta t = T/N$ et $t_n = n\Delta t$, $0 \leq n \leq N$ une discrétisation uniforme de l'intervalle $(0, T)$. En utilisant une méthode d'Euler implicite pour la discrétisation temporelle, (5.18) devient : pour $0 \leq n < N$, trouver $\tilde{\varphi}_h^{n+1} \in \mathcal{J}_h$, $\bar{\varphi}_h^{n+1} \in \mathbb{R}$ et $\lambda^{n+1} \in \mathbb{R}$ tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Lambda} \left(\frac{\tilde{\varphi}_h^{n+1}}{\Delta t} \psi_h + \kappa \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h + \frac{1}{2} [(\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \tilde{\varphi}_h^{n+1}) \psi_h - (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h) \tilde{\varphi}_h^{n+1}] \right) dx \\ \quad + \int_{\partial\Lambda} \alpha (\tilde{\varphi}_h^{n+1} + \bar{\varphi}_h^{n+1}) \psi_h ds + \lambda^{n+1} \int_{\Lambda} \psi_h dx \\ \quad = \int_{\Lambda} f^{n+1} \psi_h dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r \psi_h ds + \int_{\Lambda} \frac{\tilde{\varphi}_h^n}{\Delta t} \psi_h dx \\ \int_{\Lambda} \frac{\bar{\varphi}_h^{n+1} - \bar{\varphi}_h^n}{\Delta t} dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha (\tilde{\varphi}_h^{n+1} + \bar{\varphi}_h^{n+1}) ds = \int_{\Lambda} f^{n+1} dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r ds \\ \int_{\Lambda} \tilde{\varphi}_h^{n+1} dx = 0 \end{array} \right. \quad (5.19)$$

pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$.

Forme matricielle

Soient $M = \dim(\mathcal{J}_h)$ et ψ_1, \dots, ψ_M une base de \mathcal{J}_h . Comme $\tilde{\varphi}_h^{n+1} \in \mathcal{J}_h$,

$$\tilde{\varphi}_h^{n+1} = \sum_{j=1}^M \beta_j^{n+1} \psi_j. \quad (5.20)$$

Définissons $F^{n+1}(\psi_i)$ et G^{n+1} par

$$\begin{aligned} F^{n+1}(\psi_i) &= \int_{\Lambda} f_h^{n+1} \psi_i dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r \psi_i ds + \int_{\Lambda} \frac{\tilde{\varphi}_h^n}{\Delta t} \psi_i dx, \\ G^{n+1} &= \int_{\Lambda} f_h^{n+1} dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r dx + |\Lambda| \frac{\bar{\varphi}_h^n}{\Delta t}, \end{aligned}$$

ainsi que $a(\psi_j, \psi_i)$, $b(\psi_i)$ et $c(\psi_i)$ par

$$\begin{aligned} a(\psi_j, \psi_i) &= \int_{\Lambda} \frac{\psi_j \psi_i}{\Delta t} dx + \int_{\Lambda} \kappa \vec{\nabla} \psi_j \cdot \vec{\nabla} \psi_i dx + \frac{1}{2} \int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_j) \psi_i dx \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{\Lambda} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_i) \psi_j dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \psi_j \psi_i ds, \\ b(\psi_i) &= \int_{\partial\Lambda} \alpha \psi_i ds, \\ c(\psi_i) &= \int_{\Lambda} \psi_i dx. \end{aligned}$$

Notons encore A la matrice définie par $A_{ij} = a(\psi_j, \psi_i)$ et les vecteurs \vec{b} et \vec{c} définis par $b_i = b(\psi_i)$ et $c_i = c(\psi_i)$. Soit encore le vecteur \vec{F}^{n+1} défini par $F_i^{n+1} = F^{n+1}(\psi_i)$ et notons $\vec{\beta}^{n+1} = (\beta_1^{n+1}, \beta_2^{n+1}, \dots, \beta_M^{n+1})^T$ les inconnues. Finalement, soit

$$D = \left(\frac{|\Lambda|}{\Delta t} + \int_{\partial\Lambda} \alpha ds \right).$$

Le problème (5.19) s'écrit alors sous la forme matricielle suivante : Trouver $\vec{\beta}^{n+1} \in \mathbb{R}^M$ et deux nombres réels $\bar{\varphi}_h^{n+1}$ et λ^{n+1} tels que :

$$\left(\begin{array}{c|c|c} A & \vec{b} & \vec{c} \\ \hline \vec{b}^T & D & 0 \\ \hline \vec{c}^T & 0 & 0 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \vec{\beta}^{n+1} \\ \bar{\varphi}_h^{n+1} \\ \lambda^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{F}^{n+1} \\ G^{n+1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

Il suffit de résoudre le système linéaire (5.21) pour obtenir $\bar{\varphi}_h^{n+1}$ et $\tilde{\varphi}_h^{n+1}$, et donc φ_h^{n+1} par la relation $\varphi_h^{n+1} = \tilde{\varphi}_h^{n+1} + \bar{\varphi}_h^{n+1}$.

5.3 Validation numérique

L'objectif de cette partie est de vérifier numériquement que le schéma (5.19) satisfait les propriétés (5.8), (5.9) et (5.11) conjointement. Nous vérifions également que les discrétisations du terme convectif (L1) à (L4) ne satisfont à chaque fois qu'une seule des propriétés 1h, 2h et 3h (voir TABLE 5.1).

5.3.1 Schémas numériques et propriétés de conservation

Nous rappelons que les expressions usuelles du terme convectif sont

$$(L1) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \psi,$$

$$(L2) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = -(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \psi) \varphi,$$

$$(L3) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = \text{div}(\vec{u} \varphi) \psi,$$

$$(L4) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = \frac{1}{2} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \psi - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \psi) \varphi \right],$$

$$(L5) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = \frac{1}{2} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) (\psi - \bar{\psi}) - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \psi) (\varphi - \bar{\varphi}) \right],$$

$$(L6) \quad L(\vec{u}, \varphi, \psi) = (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi) (\psi - \bar{\psi}).$$

et que les approximations (L5) et (L6) correspondent aux schémas conservatifs présentés dans ce travail. Soit β_1 un paramètre de stabilisation, β_2 un paramètre de diffusion artificielle, avec β_1 et β_2 indépendants de h, \vec{u}, α et κ . Soit encore δ_K une fonction du Péclet local $\mathbb{P}e_K$ telle que $\delta_K = 1$ si $\mathbb{P}e_K \geq 1$ et $\delta_K = \mathbb{P}e_K$ sinon. Soit $L(\vec{u}_h, \varphi_h, \psi_h)$ une discrétisation du terme convectif définie par les relations (L1) à (L6). Les schémas numériques que nous utilisons dans cette partie sont de la forme : Pour $n = 0, \dots, N-1$, trouver $\varphi_h^{n+1} \in \mathcal{J}_h$ telle que

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{\Lambda} \frac{\varphi_h^{n+1} - \varphi_h^n}{\Delta t} \psi_h dx + \int_{\Lambda} \kappa \vec{\nabla} \varphi_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h dx + \int_{\Lambda} L(\vec{u}_h, \varphi_h^{n+1}, \psi_h) dx \\ & + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_h^{n+1} \psi_h ds + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \beta_1 \delta_K \frac{h_K}{\|\vec{u}\|} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h^{n+1}) (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \beta_2 \delta_K h_K \|\vec{u}\| (\vec{\nabla} \varphi_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx = \int_{\Lambda} f^{n+1} \psi_h dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r \psi_h ds \end{aligned} \right. \quad (5.22)$$

pour tout $\psi_h \in \mathcal{J}_h$. Dans (5.22), nous avons ajouté un terme de stabilisation de type SUPG et un terme de diffusion artificielle car $\mathbb{P}e_K \gg 1$ dans nos simulations numériques. Ces termes de stabilisation n'influencent pas la conservation de l'énergie, car ils disparaissent lorsque nous remplaçons ψ_h par 1 dans (5.22). Lorsque nous prenons la fonction test $\psi_h = \varphi_h^{n+1}$, les termes de stabilisation ne s'annulent pas, mais tous deux sont positifs et contribuent à stabiliser le schéma et (5.9) est toujours valide. Ainsi, les termes de stabilisation du schéma (5.22) n'ont aucune influence sur la conservation des propriétés (5.8), (5.9) et (5.11).

En prenant la fonction test $\psi_h \equiv 1$ dans le problème (5.22), nous obtenons la conservation de l'énergie discrète : pour $n = 0, \dots, N-1$

$$\int_{\Lambda} \varphi_h^{n+1} dx + \Delta t \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_h^{n+1} ds = \int_{\Lambda} \varphi_h^n dx + \Delta t \int_{\Lambda} f^{n+1} dx + \Delta t \int_{\partial\Lambda} \alpha \varphi_r ds. \quad (5.23)$$

Pour la stabilité L^2 , nous prenons $\psi_h = \varphi_h^{n+1}$ dans (5.22) et en négligeant le terme $\int_{\Lambda} L(\vec{u}_h, \varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1}) dx$, nous obtenons la relation : pour $n = 0, \dots, N-1$

$$\begin{aligned} & \int_{\Lambda} (\varphi_h^{n+1})^2 dx + \Delta t \int_{\partial\Lambda} \alpha (\varphi_h^{n+1})^2 ds + \Delta t \int_{\Lambda} \kappa |\vec{\nabla} \varphi_h^{n+1}|^2 dx + \Delta t S_1(\varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1}) \\ & + \Delta t S_2(\varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1}) = \int_{\Lambda} \varphi_h^{n+1} \varphi_h^n dx + \Delta t \int_{\Lambda} f^{n+1} \varphi_h^{n+1} dx \end{aligned} \quad (5.24)$$

où $S_1(\varphi_h, \psi_h)$, $S_2(\varphi_h, \psi_h)$ sont définis par

$$S_1(\varphi_h, \psi_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \beta_1 \delta_K \frac{h_K}{\|\vec{u}\|} (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \varphi_h) (\vec{u}_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx$$

et

$$S_2(\varphi_h, \psi_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \beta_2 \delta_K h_K \|\vec{u}\| (\vec{\nabla} \varphi_h \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx.$$

Notons que $S_1(\varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1})$ et $S_2(\varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1})$ sont positifs et contribuent à la stabilité L^2 . En négligeant les termes positifs $S_1(\varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1})$ et $S_2(\varphi_h^{n+1}, \varphi_h^{n+1})$, la relation (5.24) combinée avec l'inégalité de Cauchy-Schwarz implique que

$$\|\varphi_h^{n+1}\|^2 + \Delta t \|\varphi_h^{n+1}\|_1^2 \leq \|\varphi_h^{n+1}\| \cdot \|\varphi_h^n\| + \Delta t \|f^{n+1}\| \cdot \|\varphi_h^{n+1}\|.$$

En utilisant le fait que $\lambda_{1h} = \inf_{v_h \in \mathcal{J}_h} \frac{\|v_h\|_1^2}{\|v_h\|^2}$, nous obtenons

$$(1 + \lambda_{1h} \Delta t) \|\varphi_h^{n+1}\| \leq \|\varphi_h^n\| + \Delta t \|f^{n+1}\|$$

qui se réécrit

$$\frac{\|\varphi_h^{n+1}\| - \|\varphi_h^n\|}{\Delta t} + \lambda_{1h} \|\varphi_h^{n+1}\| \leq \|f^{n+1}\|. \quad (5.25)$$

Notons que (5.25) n'est rien d'autre que l'équivalent discret de la relation (5.9) et que ceci montre que le schéma est L^2 -stable. Finalement, la troisième propriété est la conservation de la solution constante, c'est-à-dire :

Si $f \equiv 0$ et $\alpha \equiv 0$, alors $\varphi_h = \text{constante}$ est une solution stationnaire de (5.22).

5.3.2 Validation numérique

Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ le domaine $[-1, 1]^2 \times [-0.1, 0.1]$ et soit le champ de vitesse

$$\vec{u}(x, y, z) = \left(-\cos\left(\frac{3\pi x}{2}\right) \sin\left(\frac{3\pi y}{2}\right), \sin\left(\frac{3\pi x}{2}\right) \cos\left(\frac{3\pi y}{2}\right), 0 \right). \quad (5.26)$$

Nous constatons que $\text{div } \vec{u} = 0$ dans Λ et $\vec{u} \cdot \vec{n} = 0$ sur $\partial\Lambda$. Définissons encore le coefficient d'échange thermique

$$\alpha = \begin{cases} 1 & \text{si } |z| < 0.1, \\ 0 & \text{si } |z| = 0.1. \end{cases} \quad (5.27)$$

Notons que le coefficient défini par la relation (5.27) entraîne que le domaine Λ est isolé en haut et en bas. Dans ce cas particulier, remarquons que le phénomène simulé est bidimensionnel. Les schémas (L5) et (L6) sont validés sur le problème suivant : trouver $\varphi : (0, T) \times \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \kappa \Delta \varphi + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = f & \text{dans } \Lambda, \\ \kappa \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = -\alpha \varphi & \text{sur } \partial\Lambda, \\ \varphi(0) = \varphi_0. \end{cases} \quad (5.28)$$

où le coefficient d'échange thermique α est celui de la relation (5.27).

Remarque 5.3.1. Le problème (5.28) n'est rien d'autre qu'une version simplifiée du problème thermique (2.31). En effet, il suffit de prendre $\rho C_p = 1$, $L = 0$ et la température extérieure φ_r nulle dans (2.31) pour se ramener au problème (5.28).

Soit \mathcal{T}_h une triangulation uniforme du domaine Λ telle que $h := \max_{K \in \mathcal{T}_h} \{\text{diam}(K)\} = 0.2$. Nous posons $\Delta t = 1[s]$ et $N = 3000$, où N est le nombre de pas temps effectué dans nos simulations. L'approximation \vec{u}_h du champ de vitesse \vec{u} utilisée dans (5.22) est obtenue par un solveur Navier-Stokes $\mathbb{P}_1 - \mathbb{P}_1$ avec une stabilisation *GLS*. Plus précisément, le champ de force utilisé pour le calcul de \vec{u}_h est tel que \vec{u} définie par (5.26) soit solution des équations de Navier-Stokes avec la pression $p(x, y, z) = \frac{1}{4}(\cos(3\pi x) + \cos(3\pi y))$. L'approximation \vec{u}_h est calculée une seule fois, avant de résoudre (5.28), et est utilisée pour chaque calcul de φ_h^{n+1} .

Cas test pour la vérification des propriétés 1h et 2h

Afin de vérifier la conservation des propriétés 1h et 2h, nous calculons f et φ_0 dans (5.28) de telle manière que la solution φ soit donnée par

$$\varphi(t, x, y, z) = (1 - e^{-\lambda t}) \left[\frac{\cos(x) - \cos(1)}{\kappa} + \sin(1) \right] \left[\frac{\cos(y) - \cos(1)}{\kappa} + \sin(1) \right].$$

avec $\lambda = 0.005$ et $\kappa = 10^{-5}$.

Cas test pour la vérification de la propriété 3h

Soit $\varphi_r \equiv 10$, κ , α et \vec{u} comme dans le cas test précédent. Afin de vérifier la conservation de la solution constante, nous résolvons le problème : trouver $\varphi : (0, \infty) \times \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \kappa \Delta \varphi + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = 0 & \text{dans } \Lambda, \\ \kappa \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = \alpha(\varphi_r - \varphi) & \text{sur } \partial \Lambda, \\ \varphi(0) = \varphi_r. \end{cases} \quad (5.29)$$

La solution exacte de (5.29) est $\varphi(t) \equiv \varphi_r$ pour tout $t > 0$.

Résultats

Soit n un entier tel que $0 \leq n \leq N - 1$. Afin de vérifier la conservation de l'énergie au temps t_{n+1} , nous définissons $\Delta P1(n)$ par

$$\Delta P1(n) = \frac{|I_1 - I_2|}{|I_1|},$$

où I_1, I_2 sont respectivement les membres de gauche et de droite de (5.23). Remarquons que $\Delta P1(n) = 0$ si et seulement si il y a conservation de l'énergie. De manière similaire, pour vérifier la stabilité L^2 au temps t_{n+1} , nous définissons l'estimateur $\Delta P2(n)$ par

$$\Delta P2(n) = \frac{|J_1 - J_2|}{|J_1|},$$

où J_1 et J_2 sont respectivement les membres de gauche et de droite de (5.24). Nous aurons la stabilité L^2 au temps t_{n+1} si $\Delta P_2(n) = 0$. Afin de vérifier la conservation de la solution constante, nous utilisons l'estimateur $\Delta P_3(n)$ défini par

$$\Delta P_3(n) = \frac{\|\varphi_h^{n+1} - \varphi_r\|_{L^\infty(\Lambda)}}{10}.$$

Notons que $\Delta P_3(n) = 0$ si et seulement si $\varphi_h^{n+1} \equiv \varphi_r$. En posant

- $\Pi_1 = \max_{0 \leq n \leq N-1} \Delta P_1(n),$
- $\Pi_2 = \max_{0 \leq n \leq N-1} \Delta P_2(n),$
- $\Pi_3 = \max_{0 \leq n \leq N-1} \Delta P_3(n),$

nous obtenons les résultats présentés dans la TABLE 5.2 (tirée de [20]). Notons que ces résultats coïncident avec ceux présentés dans la TABLE 5.1 et que seul le schéma développé dans ce travail permet de conserver les trois propriétés simultanément.

Schéma	Π_1	Π_2	Π_3
L1	$1.56 \cdot 10^{-4}$	0.0015	$1.50 \cdot 10^{-10}$
L2	$4.17 \cdot 10^{-11}$	0.0014	0.0035
L3	$4.02 \cdot 10^{-11}$	0.0015	0.0035
L4	$8.48 \cdot 10^{-5}$	$1.21 \cdot 10^{-12}$	0.0018
L5	$1.14 \cdot 10^{-11}$	$3.38 \cdot 10^{-12}$	$7.11 \cdot 10^{-14}$
L6	$1.34 \cdot 10^{-11}$	0.0015	$7.57 \cdot 10^{-14}$

TABLE 5.2 – Vérification numérique des propriétés 1h à 3h.

5.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons créé un nouveau schéma conservant l'énergie, la solution constante et qui est L^2 -stable. Les résultats numériques montrent que seul ce nouveau schéma (L5) conserve ces trois propriétés simultanément, contrairement aux discrétisations usuelles du terme convectif. Le schéma (L6) est malgré tout préféré, car il converge plus rapidement vers une solution stationnaire lorsque le champ de vitesse \vec{u} n'est pas exactement à divergence nulle. Nous n'avons pas parlé de la convergence de ce nouveau schéma (L5), mais nous nous référons à [20] pour une étude de celle-ci. Notons encore que la matrice éléments finis associée aux schémas (L5) et (L6) possède deux lignes et deux colonnes de plus que les matrices associées aux discrétisations usuelles du terme convectif, mais que cet ajout n'influence quasiment pas le temps CPU.

Chapitre 6

Résolution numérique du problème MHDTE

L'objectif du présent chapitre est de décrire la méthode utilisée pour trouver la forme des talus stationnaires présents dans le processus de Hall-Héroult. L'algorithme utilisé dans le cadre de ce travail est du même type que celui de Y. Safa (voir [48]). Cependant, de nombreuses améliorations ont été apportées, telles que l'introduction des éléments finis \mathbb{P}_1 -bulle \mathbb{P}_1 , ainsi qu'un modèle de viscosité turbulente dans le solveur Navier-Stokes stationnaire. Nous utilisons également le schéma conservatif (L6) présenté dans le chapitre 5 afin d'éviter une surestimation du volume des talus stationnaires. L'algorithme de la section 4.6 nous permettant de calculer des interfaces aluminium-bain stationnaires lorsque le creuset contenant les fluides est modélisé, nous pouvons dès lors calculer des talus stationnaires avec des interfaces aluminium-bain non planes, ce qui est un grand changement par rapport aux travaux de Y. Safa. L'étude de l'influence de l'interface sur les talus est dès lors possible. En plus de ces améliorations, le partage des tétraèdres développé au chapitre 3 est utilisé afin de gagner en précision sur le front de solidification. L'explication détaillée de toutes ces améliorations constitue l'objectif du présent chapitre.

Après une brève introduction, nous présentons les schémas numériques utilisés pour résoudre chacun des problèmes (potentiel, hydrodynamique et thermique), puis nous décrivons l'algorithme utilisé pour trouver la solution stationnaire du problème MHD-thermoélectrique (abrégé MHDTE). Nous terminons cette partie par la présentation de la méthode d'adaptation de maillage utilisée afin de gagner en précision sur le front de solidification.

6.1 Introduction et notations utilisées

Afin de simplifier la présentation du problème MHDTE, nous supposons que l'interface aluminium-bain Γ est donnée au cours du temps. Pour des raisons de simplification, nous faisons également l'hypothèse qu'une approximation \vec{B}_h du champ d'induction est connue au cours du temps. Comme dans le chapitre 4, \vec{B}_h est une approximation du champ d'induction \vec{B} correspondant à une interface aluminium-bain horizontale.

Soit \mathcal{S}_h une triangulation de la cuve d'électrolyse Λ de paramètre $h > 0$. Soit encore $\Delta t > 0$ et $t_n = n\Delta t$ avec $n \in \mathbb{N}$ une discrétisation uniforme de l'intervalle $(0, \infty)$. L'approche choisie pour calculer les zones solides stationnaires est une méthode de marche temporelle qui, pour rappel, consiste à calculer les valeurs des différentes variables (la température T , l'enthalpie H , le champ de vitesse \vec{u} et la densité de courant \vec{j}) au temps t_{n+1} en fonction de leur valeur au temps t_n . Ainsi, dans toute la section 6.2, nous supposons connus

1. Une approximation H_h^n de l'enthalpie au temps t_n sur le maillage \mathcal{S}_h ,
2. Une approximation T_h^n de la température au temps t_n sur la triangulation \mathcal{S}_h ,
3. Une approximation \vec{u}_h^n du champ de vitesse au temps t_n sur le maillage \mathcal{S}_h .

Soit \mathcal{U}_h une triangulation du domaine Ω telle que \mathcal{S}_h soit un prolongement du maillage \mathcal{U}_h (au sens de la section 4.1) et soit P_{bc} un sommet du maillage \mathcal{U}_h . Comme pour la présentation de la MHD sur un maillage fixe (chapitre 4), nous introduisons maintenant les espaces éléments finis utilisés dans ce chapitre. Ainsi, nous considérons l'espace

$$\mathcal{J}_h = \left\{ W \in C^0(\Lambda) : W|_K \in \mathbb{P}^1(K) \ \forall K \in \mathcal{S}_h \text{ et } W(P_{bc}) = 0 \right\}, \quad (6.1)$$

qui est utilisé pour le calcul de la densité de courant au temps t_{n+1} . Pour l'approximation de la température au temps t_{n+1} , nous utilisons l'espace suivant :

$$\Theta_h = \left\{ \psi \in C^0(\Lambda) : \psi|_K \in \mathbb{P}^1(K) \ \forall K \in \mathcal{S}_h \right\}. \quad (6.2)$$

En reprenant la définition de B_K faite à la section 4.1, les espaces éléments finis utilisés pour la résolution numérique des équations de Navier-Stokes sont

$$\mathcal{V}_h = \left\{ \vec{v} \in (C^0(\Omega))^3 : \vec{v}|_K \in (\mathbb{P}^1(K) \oplus B_K)^3, \forall K \in \mathcal{U}_h \text{ et } \vec{v}|_{\partial\Omega} = \vec{0} \right\}, \quad (6.3)$$

pour la vitesse et

$$\mathcal{Q}_h = \left\{ q \in C^0(\Omega) : q|_K \in \mathbb{P}^1(K) \ \forall K \in \mathcal{U}_h \text{ et } q(P_{bc}) = 0 \right\}. \quad (6.4)$$

pour la pression.

6.2 Schémas numériques

Nous présentons à présent les schémas numériques utilisés pour la résolution du problème MHDTE. Comme dans le chapitre 4, nous débutons par le schéma numérique utilisé pour calculer la densité de courant, suivi de l'algorithme utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes stationnaires. Nous terminons avec la présentation de la méthode utilisée pour calculer la température et l'enthalpie.

6.2.1 Potentiel et courant

Nous rappelons que la densité de courant est définie sur toute la cuve d'électrolyse Λ et qu'en conséquence, le calcul de la densité de courant au temps t_{n+1} est effectué sur le domaine Λ (donc sur le domaine fluide Ω , les anodes, les cathodes, les isolants, le caisson ferromagnétique, etc.). En utilisant une méthode de Galerkin classique, la discrétisation spatiale du problème (2.26) est : trouver $V_h^{n+1} \in \mathcal{J}_h$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \sigma \vec{\nabla} V_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} W_h dx &= \int_{\Lambda} \sigma (\vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h) \cdot \vec{\nabla} W_h dx \\ &+ \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{in}|} \int_{\Gamma_{in}} W_h ds - \frac{\mathcal{I}}{|\Gamma_{out}|} \int_{\Gamma_{out}} W_h ds \end{aligned} \quad (6.5)$$

pour tout $W_h \in \mathcal{J}_h$. Une fois le potentiel V_h^{n+1} connu, l'approximation \vec{j}_h^{n+1} de la densité de courant au temps t_{n+1} est obtenue de manière directe par la relation

$$\vec{j}_h^{n+1} = \sigma \left(-\vec{\nabla} V_h^{n+1} + \vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h \right). \quad (6.6)$$

Notons que dans la formulation faible (6.5), la vitesse \vec{u}_h^n utilisée lors de l'intégration du terme $\sigma (\vec{u}_h^n \wedge \vec{B}_h)$ est le prolongement par $\vec{0}$ du champ de vitesse \vec{u}_h^n du maillage \mathcal{U}_h au maillage \mathcal{S}_h .

6.2.2 Hydrodynamique

Comme mentionné précédemment, le pas de temps Δt utilisé pour le calcul des talus stationnaires est de l'ordre de 1000 secondes. Dans un cas stable, les simulations numériques ont montré qu'une solution stationnaire du problème MHD avec interface libre est obtenue après 500 secondes. Ainsi, nous faisons l'hypothèse qu'entre t_n et t_{n+1} , l'écoulement des fluides a atteint un régime stationnaire. Par conséquent, les équations de Navier-Stokes stationnaires sont utilisées afin de modéliser l'écoulement des fluides dans le problème thermoélectrique. En multipliant les équations de Navier-Stokes stationnaires par une fonction test \vec{v} et en les intégrant sur le domaine Ω , la forme faible de celles-ci est : trouver $\vec{u} \in (H_0^1(\Omega))^3$ et $p \in L_0^2(\Omega)$ telles que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \left(2\mu \varepsilon(\vec{u}) : \varepsilon(\vec{v}) + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} \cdot \vec{v} - p \operatorname{div} \vec{v} + K_\varepsilon \vec{u} \cdot \vec{v} \right) dx \\ \quad = \int_{\Omega} (\rho \vec{g} + \vec{j} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{v} dx, \\ \int_{\Omega} q \operatorname{div} \vec{u} dx = 0, \end{cases} \quad (6.7)$$

pour tout $\vec{v} \in (H_0^1(\Omega))^3$, tout $q \in L_0^2(\Omega)$ et où K_ε est calculé avec la fraction liquide au temps t_n , notée f_l^n . Afin de mieux modéliser l'écoulement des fluides, nous utilisons le modèle de viscosité turbulente défini à la section 4.3.1. En notant

$$|\varepsilon(\vec{u})| = \left(2 \sum_{i,j=1}^3 (\varepsilon_{ij}(\vec{u}))^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

nous rappelons que ce modèle de viscosité turbulente est défini par

$$\mu(|\varepsilon(\vec{u})|) = \mu_L + \alpha_t \rho l^2 |\varepsilon(\vec{u})|,$$

où μ_L est la viscosité laminaire, $\alpha_t > 0$ est un paramètre adimensionnel et l est une longueur caractéristique égale à 1 dans nos simulations. L'introduction de ce modèle de turbulence ajoute une non-linéarité sur le terme visqueux dans les équations de Navier-Stokes stationnaires. Afin de résoudre numériquement le problème (6.7), nous utilisons une méthode de type Newton développée dans [29]. Cet algorithme permet de traiter simultanément la non-linéarité de la viscosité et du terme de convection. Soit \bar{K} un entier positif. En notant $\mu'(|\varepsilon(\vec{u})|) = \alpha_t \rho$ et \vec{u}_h^0 le champ de vitesse initial, le schéma utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes stationnaires est : pour $k = 0, \dots, \bar{K}$, trouver $\vec{u}_h^{k+1} \in \mathcal{V}_h$, $p_h^{k+1} \in \mathcal{Q}_h$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} 2\mu(|\varepsilon(\vec{u}_h^k)|) \varepsilon(\vec{u}_h^{k+1}) : \varepsilon(\vec{v}_h) dx + \int_{\Omega} \rho(\vec{u}_h^k \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{k+1} \cdot \vec{v}_h dx \\ + \int_{\Omega} \rho(\vec{u}_h^{k+1} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^k \cdot \vec{v}_h dx - \int_{\Omega} p_h^{k+1} \operatorname{div} \vec{v}_h dx + \int_{\Omega} K_\varepsilon \vec{u}_h^{k+1} \cdot \vec{v}_h dx \\ + \int_{\Omega} \frac{\mu'(|\varepsilon(\vec{u}_h^k)|)}{|\varepsilon(\vec{u}_h^k)|} (\varepsilon(\vec{u}_h^k) : \varepsilon(\vec{u}_h^{k+1})) (\varepsilon(\vec{u}_h^k) : \varepsilon(\vec{v}_h)) dx \\ = \int_{\Omega} (\rho \vec{g} + \vec{j}_h^{n+1} \wedge \vec{B}_h) \cdot \vec{v}_h dx + \int_{\Omega} \rho(\vec{u}_h^k \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^k \cdot \vec{v}_h dx \\ + \int_{\Omega} \frac{\mu'(|\varepsilon(\vec{u}_h^k)|)}{|\varepsilon(\vec{u}_h^k)|} (\varepsilon(\vec{u}_h^k) : \varepsilon(\vec{u}_h^k)) (\varepsilon(\vec{u}_h^k) : \varepsilon(\vec{v}_h)) dx \\ \int_{\Omega} q_h \operatorname{div} \vec{u}_h^{k+1} = 0 \end{array} \right. \quad (6.8)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h$ et tout $q_h \in \mathcal{Q}_h$.

Remarque 6.2.1. Habituellement, le champ de vitesse \vec{u}_h^0 utilisé comme condition initiale de (6.8) est l'approximation \vec{u}_h^n du champ de vitesse \vec{u} au temps t_n . Lors du calcul de l'approximation du champ de vitesse \vec{u} au temps $t_1 = \Delta t$, nous prenons comme condition initiale $\vec{u}_h^0 = \vec{0}$ ainsi que le tenseur de viscosité

$$\mu = \begin{pmatrix} 10 & 10 & 0.5 \\ 10 & 10 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}$$

pour le premier pas de la méthode de Newton (6.8). Les coefficients du tenseur de viscosité ci-dessus sont issus d'une étude théorique et ont été utilisés dans différents articles (voir [16, 17]).

6.2.3 Température et enthalpie

Dans cette partie du document, nous présentons le schéma numérique utilisé pour résoudre numériquement le problème (2.32). Soit \vec{u}_h^{n+1} l'approximation du champ de vitesse au temps

t_{n+1} calculée au paragraphe 6.2.2 et notons T^n et H^n des approximations de la température et de l'enthalpie au temps t_n . En utilisant un schéma semi-implicite pour la discrétisation temporelle de (2.32), on obtient le problème : trouver $H^{n+1}, T^{n+1} \in H^1(\Lambda)$ telles que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\frac{H^{n+1} - H^n}{\Delta t} \psi + \kappa(T^n) \vec{\nabla} T^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi + \rho C_p(\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} T^{n+1}) \psi \right) dx \\ + \int_{\partial\Lambda} \alpha T^{n+1} \psi ds = \int_{\Lambda} \frac{\|\vec{j}^{n+1}\|^2}{\sigma(T^n)} \psi dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha T_a \psi ds, \end{aligned} \quad (6.9)$$

pour tout $\psi \in H^1(\Lambda)$. Soit T_s (resp. T_ℓ) la température à laquelle le bain est totalement solide (resp. liquide) et notons H_s (resp. H_ℓ) l'enthalpie correspondante. Nous rappelons que la relation liant l'enthalpie H à la température étant monotone croissante, il existe une fonction $\beta : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ telle que $T = \beta(H)$ (voir FIGURE 6.1).

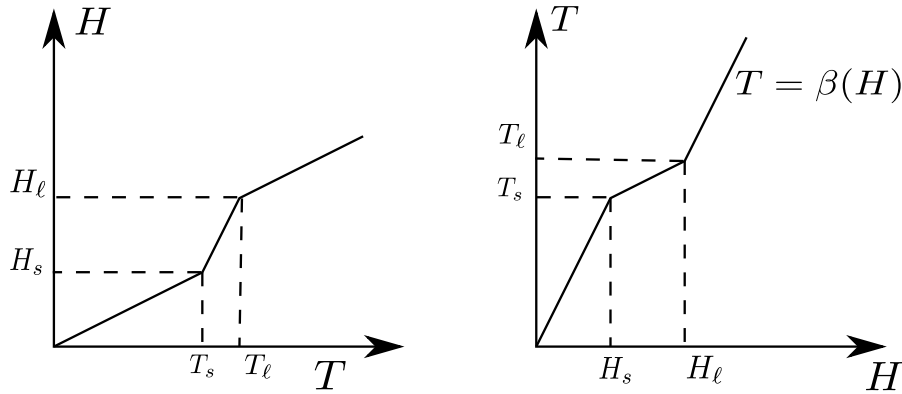


FIGURE 6.1 – Illustration graphique des relations entre la température et l'enthalpie.

Nous faisons l'hypothèse que le changement de phase n'est pas effectué de manière isotherme, *i.e.* $T_s < T_\ell$, mais de manière linéaire sur l'intervalle $[T_s, T_\ell]$ afin d'éviter une dégénérescence de la solution de (2.32). Cela a pour conséquence que la fonction β est bijective, linéaire par morceaux et continue. Sous cette hypothèse, en dérivant formellement, nous obtenons

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \beta'(H) \frac{\partial H}{\partial t} \iff \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{\beta'(H)} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (6.10)$$

et nous posons

$$\frac{H^{n+1} - H^n}{\Delta t} = \gamma \frac{T^{n+1} - \beta(H^n)}{\Delta t}, \quad (6.11)$$

où $\gamma > 0$ est un paramètre de relaxation du schéma correspondant au terme $\frac{1}{\beta'(H)}$. En

utilisant la relation (6.11), le problème (6.9) devient : trouver $T^{n+1} \in H^1(\Lambda)$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\gamma \frac{T^{n+1} - \beta(H^n)}{\Delta t} \psi + \kappa(T^n) \vec{\nabla} T^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi + \rho C_p(\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} T^{n+1}) \psi \right) dx \\ + \int_{\partial\Lambda} \alpha T^{n+1} \psi ds = \int_{\Lambda} \frac{\|\vec{j}^{n+1}\|^2}{\sigma(T^n)} \psi dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha T_a \psi ds, \end{aligned} \quad (6.12)$$

pour tout $\psi \in H^1(\Lambda)$. Nous posons alors

$$H^{n+1} = H^n + \gamma(T^{n+1} - \beta(H^n)). \quad (6.13)$$

Notons que dans la formulation (6.12), T^{n+1} est une pseudo-température lorsque $\gamma \neq \frac{1}{\beta'(H)}$, la vraie température T^{n+1} satisfaisant la relation $T^{n+1} = \beta(H^{n+1})$. Afin d'éviter toute ambiguïté, la pseudo-température au temps t_{n+1} sera notée θ^{n+1} . Ainsi, le problème (6.12) se réécrit : trouver $\theta^{n+1} \in H^1(\Lambda)$ telle que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} \left(\gamma \frac{\theta^{n+1} - \beta(H^n)}{\Delta t} \psi + \kappa(T^n) \vec{\nabla} \theta^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi + \rho C_p(\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \theta^{n+1}) \psi \right) dx \\ + \int_{\partial\Lambda} \alpha \theta^{n+1} \psi ds = \int_{\Lambda} \frac{\|\vec{j}^{n+1}\|^2}{\sigma(T^n)} \psi dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha T_a \psi ds, \end{aligned} \quad (6.14)$$

pour tout $\psi \in H^1(\Lambda)$, et on pose

$$\begin{aligned} H^{n+1} &= H^n + \gamma(\theta^{n+1} - \beta(H^n)), \\ T^{n+1} &= \beta(H^{n+1}). \end{aligned} \quad (6.15)$$

Si le schéma (6.14) converge vers une solution stationnaire lorsque n tend vers l'infini, nous tirons de (6.15) que la pseudo-température stationnaire θ satisfait $\theta = \beta(H)$, où H représente l'enthalpie stationnaire. Ainsi, θ est la vraie température lorsque le schéma (6.14) a convergé. Notons encore qu'il a été prouvé que le schéma (6.14) - (6.15) est stable si le paramètre de relaxation γ satisfait $0 < \gamma \leq \frac{1}{\sup_{s \in \mathbb{R}^+} \beta'(s)}$ (voir par exemple [5, 33, 38]).

Introduisons à présent quelques notations avant de présenter la discrétisation en espace du problème (6.14). Nous rappelons que des approximations éléments finis H_h^n et T_h^n de l'enthalpie et de la température au temps t_n sont connues. Soit $\bar{\beta}(H_h^n) = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \beta(H_h^n) dx$ la moyenne de $\beta(H_h^n)$ sur Λ et $\tilde{\beta}(H_h^n) = \beta(H_h^n) - \bar{\beta}(H_h^n)$. Soient encore $\beta_1 > 0$ et $\beta_2 > 0$ des paramètres de stabilisation, h_K le diamètre du tétraèdre $K \in \mathcal{S}_h$ et la fonction δ_K définie par la relation

$$\delta_K = \begin{cases} Pe_K & \text{si } Pe_K < 1 \\ 1 & \text{si } Pe_K \geq 1, \end{cases} \quad (6.16)$$

où Pe_K est le nombre de péclet local défini par

$$Pe_K = \rho C_p \frac{\|\vec{u}\| h_K}{3\kappa(T_h^n)}.$$

Soient encore $\bar{\theta}_h^{n+1} = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda} \theta_h^{n+1} dx$ la moyenne de θ_h^{n+1} sur Λ et $\tilde{\theta}_h^{n+1} = \theta_h^{n+1} - \bar{\theta}_h^{n+1}$. En discrétisant (6.14) par une méthode des éléments finis standard combinée avec le schéma conservatif (L6), la discrétisation spatiale du problème (6.14) est : trouver $\tilde{\theta}_h^{n+1} \in \Theta_h$, $\bar{\theta}_h^{n+1} \in \mathbb{R}$ et $\lambda^{n+1} \in \mathbb{R}$ tels que

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{\Lambda} \gamma \frac{\tilde{\theta}_h^{n+1}}{\Delta t} \psi_h dx + \int_{\Lambda} \kappa(T_h^n) \vec{\nabla} \tilde{\theta}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h dx + \int_{\Lambda} \rho C_p (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\theta}_h^{n+1}) \psi_h dx \\ & + \int_{\partial\Lambda} \alpha \tilde{\theta}_h^{n+1} \psi_h ds + \int_{\partial\Lambda} \alpha \bar{\theta}_h^{n+1} \psi_h ds + \lambda^{n+1} \int_{\Lambda} \psi_h dx \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \beta_1 \int_K \frac{\delta_K h_K}{\|\vec{u}_h^{n+1}\|} \rho C_p (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \tilde{\theta}_h^{n+1}) (\vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \beta_2 \int_K \rho C_p \delta_K h_K \|\vec{u}_h^{n+1}\| (\vec{\nabla} \tilde{\theta}_h^{n+1} \cdot \vec{\nabla} \psi_h) dx \\ & = \int_{\Lambda} \frac{\|\vec{j}_h^{n+1}\|^2}{\sigma(T_h^n)} \psi_h dx + \int_{\partial\Lambda} \alpha T_a \psi_h ds + \int_{\Lambda} \gamma \frac{\tilde{\beta}(H_h^n)}{\Delta t} \psi_h dx, \\ & \int_{\partial\Lambda} \alpha \tilde{\theta}_h^{n+1} ds + \left(\gamma \frac{|\Lambda|}{\Delta t} + \int_{\partial\Lambda} \alpha ds \right) \bar{\theta}_h^{n+1} = \int_{\Lambda} f_h^{n+1} dx + \int_{\Lambda} \alpha T_a dx + \gamma \frac{|\Lambda|}{\Delta t} \bar{\beta}(H_h^n), \\ & \int_{\Lambda} \tilde{\theta}_h^{n+1} dx = 0, \end{aligned} \right. \quad (6.17)$$

pour tout $\psi_h \in \Theta_h$. Une fois $\tilde{\theta}_h^{n+1}$ et $\bar{\theta}_h^{n+1}$ connus, nous mettons à jour l'enthalpie et la température en utilisant les relations

$$\begin{aligned} \theta_h^{n+1} &= \tilde{\theta}_h^{n+1} + \bar{\theta}_h^{n+1}, \\ H_h^{n+1} &= H_h^n + \gamma(\theta_h^{n+1} - \beta(H_h^n)), \\ T_h^{n+1} &= \beta(H_h^{n+1}). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Dans la suite de ce document, le schéma (6.17)-(6.18) sera appelé **schéma de Chernoff conservatif**.

Remarque 6.2.2. Afin de supprimer des oscillations numériques nuisant à la précision de la frontière solide-liquide, nous avons ajouté deux termes de stabilisation dans le schéma (6.17). Le premier est un terme de type SUPG, qui permet de supprimer les oscillations dans la direction du champ de vitesse. Le second est un terme de diffusion artificielle (voir [44]) permettant de supprimer les oscillations numériques transverses au champ de vitesse.

Remarque 6.2.3. Dans la section 2.1, nous avons supposé connue la fraction liquide f_l en fonction de la température T pour toute température T , c'est-à-dire la valeur de $f_l(T)$ pour tout T . Au moyen de la fonction $\beta : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$, il est possible de redéfinir la fraction liquide comme fonction de l'enthalpie en définissant $\bar{f}_l(H) = f_l(\beta(H))$. Afin d'alléger l'écriture, nous notons la fraction liquide f_l lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté.

6.2.4 Modèle de conductivité thermique turbulente

La température T est transportée par un champ de vitesse \vec{u} turbulent qui permet de mieux diffuser la température T (voir [43, 13]). Afin d'en tenir compte dans les simulations numériques, nous introduisons un modèle de conductivité thermique turbulente similaire à (4.8) en posant

$$\kappa = \kappa_L + \kappa_t, \quad (6.19)$$

où λ_L est la conductivité thermique des fluides pour un écoulement laminaire et λ_t une correction afin de tenir compte de la turbulence. En se basant sur les ouvrages [43, 13], la viscosité turbulente μ_t est liée au paramètre λ_t par la relation suivante :

$$\kappa_t = \frac{\mu_t C_p}{Pr_t}, \quad (6.20)$$

où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent. Sur les recommandations de [22], nous prenons un nombre de Prandtl turbulent constant dans les fluides et égal à 0.65. Ainsi, le modèle de conductivité thermique turbulente utilisé est :

$$\kappa|_K = \kappa_L + \beta_t \rho C_p \delta_K h_K^2 \left[\sum_{i,j=1}^3 (\epsilon_{ij}(\vec{u}))^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad \forall K \in \mathcal{S}_h, \quad (6.21)$$

où $\beta_t > 0$ est un paramètre numérique à ajuster, δ_K est la fonction définie par la relation (6.16) et h_K est le diamètre du tétraèdre K de \mathcal{S}_h .

6.3 Résolution du problème MHDTE avec interface fixée

Nous décrivons à présent la méthode de marche temporelle utilisée pour trouver la solution stationnaire du problème MHDTE. Nous rappelons que pour des raisons de simplification, l'interface aluminium-bain Γ est supposée connue et fixe au cours du temps. Soit donc \mathcal{S}_h une triangulation de la cuve d'électrolyse Λ de paramètre $h > 0$ conforme à la position de l'interface Γ . Soient encore \vec{u}_h^0 et H_h^0 des approximations du champ de vitesse initial \vec{u}^0 et de l'enthalpie initiale H^0 . Notons encore f_l^n et σ^n la fraction liquide et la conductivité électrique au temps t_n . L'algorithme utilisé pour calculer la solution stationnaire du problème MHDTE est alors : pour $n \geq 0$,

1. Calculer la fraction liquide f_l^n à partir de H_h^n .
2. Calculer la densité de courant \vec{j}_h^{n+1} avec le schéma (6.5) et la relation (6.6), en utilisant \vec{u}_h^n comme champ de vitesse et σ^n comme conductivité électrique.
3. Calculer le champ de vitesse \vec{u}_h^{n+1} sur le maillage \mathcal{U}_h avec le schéma (6.8), en utilisant f_l^n comme fraction liquide et \vec{j}_h^{n+1} comme densité de courant.
4. Calculer T_h^{n+1} à l'aide du schéma de Chernoff conservatif (6.17), en utilisant \vec{u}_h^{n+1} comme champ de vitesse, \vec{j}_h^{n+1} comme densité de courant et σ^n comme conductivité électrique.

La méthode est illustrée dans la FIGURE 6.2.

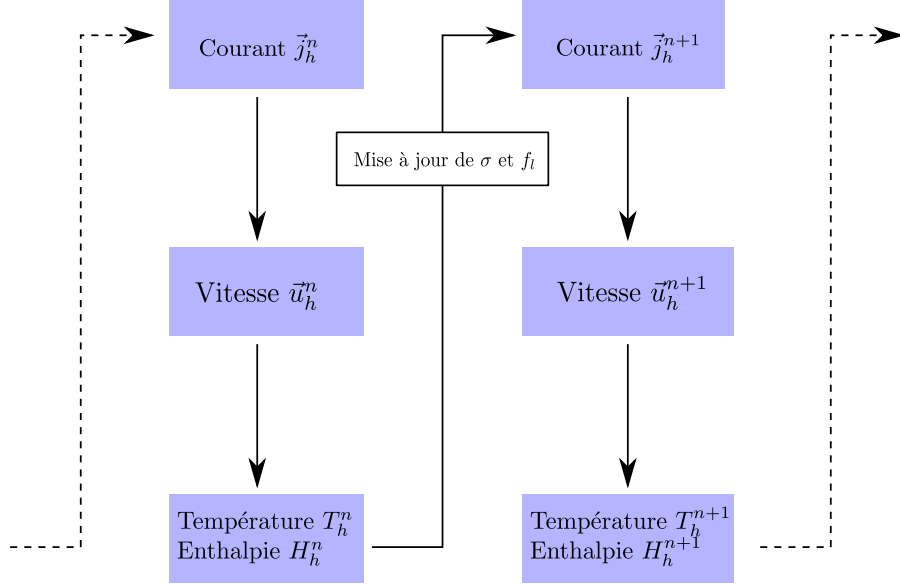


FIGURE 6.2 – Algorithme de couplage MHD-thermique avec interface fixée.

6.4 Adaptation locale du maillage au front de solidification

Lors du calcul des talus stationnaires, des oscillations de la fraction liquide apparaissent sur le front de solidification lorsque les talus sont quasi-stationnaires. Ces oscillations sont problématiques, car elles ralentissent la convergence vers une solution stationnaire. Afin d'en limiter l'effet, et pour gagner en précision sur le front de solidification, nous utilisons le raffinement de maillage développé à la section 3.3.1. Durant toute cette section, pour des raisons de simplification, nous supposons que l'interface aluminium-bain est horizontale et qu'elle ne varie pas au cours du temps. Nous reprenons également les notations introduites dans la section 6.1 et nous rappelons que le front de solidification F est défini par

$$F = \{\vec{x} \in \Omega : f_l(H(\vec{x})) = 0.5\}. \quad (6.22)$$

Avant de présenter la méthode utilisée dans nos travaux, nous introduisons la définition suivante.

Définition 6.4.1. Soit S_h^n une triangulation de la cuve d'électrolyse Λ . S_h^n est dite conforme à la position du front de solidification F au temps t_n si F est une réunion de faces de tétraèdres de S_h^n .

6.4.1 Raffinement de la triangulation

Soit S_h une triangulation de la cuve d'électrolyse Λ conforme à une interface aluminium-bain horizontale et soit \mathcal{U}_h une triangulation du domaine Ω telle que S_h soit un prolongement

du maillage \mathcal{U}_h (au sens de la section 4.1). Nous supposons qu'une approximation f_l^n de la fraction liquide au temps t_n est connue sur les sommets du maillage \mathcal{U}_h . Nous définissons alors la fonction

$$\chi_h^n(\vec{x}) = \begin{cases} f_l^n(\vec{x}) - \frac{1}{2} & \text{si } \vec{x} \in \Omega, \\ 0 & \text{si } \vec{x} \in \Lambda \setminus \Omega. \end{cases} \quad (6.23)$$

Le maillage \mathcal{S}_h est alors raffiné à l'aide de l'algorithme du paragraphe 3.3.1 utilisé avec la fonction χ_h^n définie par (6.23) et notons \mathcal{S}_h^n le maillage raffiné obtenu. De par sa construction, \mathcal{S}_h^n est une triangulation en tétraèdres du domaine Λ conforme à la position du front de solidification au temps t_n .

6.4.2 Calculs des talus stationnaires

Notons \mathcal{S}_h^n et \mathcal{U}_h^n les triangulations des domaines Λ et Ω conformes à la position du front de solidification au temps t_n telles que \mathcal{S}_h^n soit un prolongement du maillage \mathcal{U}_h^n (au sens de la section 4.1). Soit encore \vec{u}_h^0 et \vec{H}_h^0 des approximations de la vitesse et de l'enthalpie initiale. L'algorithme de raffinement de maillage utilisé pour calculer les talus stationnaires est le suivant : pour $n \geq 0$,

1. Calculer la fonction χ_h^n sur le maillage \mathcal{S}_h en utilisant la relation (6.23).
2. Raffiner le maillage \mathcal{S}_h en une triangulation \mathcal{S}_h^n conforme à la position du front de solidification au temps t_n en utilisant l'algorithme (3.3.1) appliqué à la fonction χ_h^n .
3. Interpoler la température T_h^n , l'enthalpie H_h^n , l'induction \vec{B}_h et le champ de vitesse \vec{u}_h^n du maillage \mathcal{S}_h à la triangulation \mathcal{S}_h^n en utilisant la méthode du paragraphe 4.5.
4. Imposer les conditions de bord des différents problèmes, à savoir,
 - Potentiel électrique,
 - Hydrodynamique,
 - Température et enthalpie.
5. Calculer la fraction liquide f_l^n à partir de H_h^n .
6. Calculer la densité de courant \vec{j}_h^{n+1} avec le schéma (6.5) et la relation (6.6), en utilisant \vec{u}_h^n comme champ de vitesse et σ^n comme conductivité électrique.
7. Calculer le champ de vitesse \vec{u}_h^{n+1} sur le maillage \mathcal{U}_h^n avec le schéma (6.8), en utilisant f_l^n comme fraction liquide et \vec{j}_h^{n+1} comme densité de courant.
8. Calculer T_h^{n+1} à l'aide du schéma de Chernoff conservatif (6.17), en utilisant \vec{u}_h^{n+1} comme champ de vitesse, \vec{j}_h^{n+1} comme densité de courant et σ^n comme conductivité électrique.
9. Restreindre \vec{u}_h^{n+1} , T_h^{n+1} et H_h^{n+1} du maillage \mathcal{S}_h^n à la triangulation \mathcal{S}_h .
10. Effacer tout ce qui est lié à \mathcal{S}_h^n et \mathcal{U}_h^n .

6.5 Conclusions

L'algorithme utilisé pour trouver les talus stationnaires a subi de nombreuses améliorations depuis les travaux de Y. Safa [48]. Avec l'introduction du modèle de viscosité turbulente, l'écoulement des fluides est plus réaliste et permet de mieux diffuser la température. Afin de tenir compte de cette meilleure diffusion de la température, nous avons introduit un modèle de conductivité thermique turbulente. De plus, l'utilisation du schéma de Chernoff conservatif entraîne que le volume des talus stationnaires n'est plus surestimé, contrairement à l'algorithme utilisé dans [48]. Ainsi, l'approche développée dans nos travaux permet d'obtenir des résultats plus réalistes que la méthode utilisée par Y. Safa. En conclusion, nous recommandons l'usage de la méthode du paragraphe 6.3 pour le calcul des talus stationnaires présents dans le processus de Hall-Héroult.

De plus, l'algorithme de la section 4.6 permettant de calculer des interfaces aluminium-bain stationnaires lorsque le creuset contenant les fluides est modélisé, les talus stationnaires peuvent désormais être obtenus avec une frontière aluminium-électrolyte non plane. Cela est une amélioration importante qui nous permet d'étudier l'influence de l'interface sur les talus, chose qu'il était impossible de faire dans le logiciel ALUCCELL avant le présent travail. Une étude de l'impact de la frontière aluminium-bain sur les zones solides stationnaires est effectuée dans le prochain chapitre.

En plus de ces améliorations, nous avons développé au paragraphe 6.4 un algorithme basé sur le raffinement du maillage développé dans la section 3.3.1. Cette nouvelle méthode raffine la triangulation au voisinage du front de solidification, ce qui permet d'avoir plus d'inconnues à proximité de la frontière liquide-solide, et donc plus de précision sur le front de solidification. De plus, avec l'algorithme de la section 6.4, le domaine liquide Ω_{liq} est connu de manière explicite, ce qui permet de résoudre les équations de Navier-Stokes uniquement sur Ω_{liq} . Cela entraîne une diminution du temps CPU pris pour la résolution du problème (6.8), qui peut éventuellement diminuer le temps CPU pris pour calculer les talus stationnaires. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre 7. La validation de la méthode de la section 6.4 est effectuée dans le prochain chapitre, de même que sa comparaison avec l'algorithme du paragraphe 6.3.

Chapitre 7

Validation numérique

La première partie de ce chapitre est consacrée à la validation de l'algorithme eulérien de type transitoire développé au chapitre 4. Dans la suite de ce document, la méthode de la section 4.6 sera souvent appelée *approche eulérienne* afin d'alléger l'écriture. Notre algorithme eulérien est validé sur plusieurs situations physiques, comme par exemple les modes gravitationnels et l'expérience de Coventry. Les résultats transitoires obtenus par le schéma de la section 4.6 sont comparés avec ceux de l'approche lagrangienne utilisée jusqu'à maintenant (voir [51]). Nous montrons que les deux approches donnent des résultats similaires lorsque la solidification des fluides est négligée, c'est-à-dire lorsque le domaine solide Ω_s est vide. Les solutions stationnaires du problème MHD avec interface libre obtenues par les algorithmes eulérien et lagrangien sont également comparées sur une cuve d'électrolyse simplifiée, ainsi que sur une cuve réelle. Les résultats obtenus montrent que la méthode développée à la section 4.6 est implémentée de manière correcte et permet de retrouver les résultats obtenus par l'algorithme transitoire de type lagrangien utilisé jusqu'à maintenant.

La deuxième partie de ce chapitre est consacrée aux interactions du processus de solidification avec l'interface aluminium-bain. Dans le paragraphe 7.2, en utilisant l'algorithme de la section 4.6, nous étudions l'influence des talus sur l'interface aluminium-bain en comparant les interfaces stationnaires obtenues pour différents domaines solides Ω_s . Il ressort de cette étude que l'interface est sensible à la forme des talus. Dans la section 7.3, l'influence de l'interface aluminium-bain sur les talus stationnaires est également étudiée. Nous montrons que ceux-ci sont peu sensibles à la position de la frontière aluminium-électrolyte.

Nous concluons ce chapitre avec la validation de l'algorithme de raffinement local du maillage au voisinage du front de solidification présenté au chapitre 6. Autant pour une cuve d'électrolyse simplifiée que sur une cuve industrielle, nous comparons la solution stationnaire obtenue par l'algorithme de la section 6.4 avec celle trouvée par la méthode du paragraphe 6.3. Nous montrons que le raffinement du maillage au voisinage du front de solidification ne change que très légèrement la forme des talus stationnaires.

7.1 Validation de la MHD sur maillage fixe

Le but de cette section est de montrer que l'algorithme transitoire de type eulérien développé au chapitre 4 est implémenté de manière correcte. Nous comparons également les résultats obtenus par notre méthode avec ceux trouvés par l'approche lagrangienne utilisée jusqu'à maintenant. Dans un premier temps, nous validons notre algorithme dans le cas particulier où le domaine solide Ω_s est vide. Avec cette hypothèse, les résultats obtenus par la méthode développée au paragraphe 4.6 peuvent ainsi être comparés à ceux trouvés par l'approche lagrangienne utilisée jusqu'à maintenant. Pour commencer, nous comparons les résultats transitoires obtenus par les algorithmes lagrangien [51] et eulérien du paragraphe 4.6 dans une situation physique où les forces agissant sur les fluides sont uniquement gravitationnelles, puis sur la reproduction numérique d'une expérience de laboratoire (l'expérience de Coventry). Nous comparons également les solutions stationnaires trouvées par les algorithmes lagrangien et eulérien sur une cuve d'électrolyse simplifiée, appelée *cuve numérique*, ainsi que sur une cuve industrielle. Nous terminons cette section avec la validation de la méthode d'extension de la déformation de l'interface dans les talus développée à la section 4.4.3.

7.1.1 Modes gravitationnels

Le but de cette section est de vérifier l'implémentation de l'algorithme eulérien développé au paragraphe 4.6. Pour ce faire, nous simulons numériquement le premier mode gravitationnel des équations d'Euler, sur lequel des résultats théoriques sont disponibles. En conséquence, le problème considéré dans ce paragraphe est celui de deux fluides immiscibles à viscosité nulle soumis uniquement à la force de gravitation. Dans cette configuration particulière, il est possible de connaître l'évolution temporelle de l'interface si la frontière initiale entre les fluides est bien choisie.

Soit $\Omega = [-L_x, L_x] \times [-L_y, L_y] \times [-L_z, L_z] \subset \mathbb{R}^3$ un parallélépipède, $T > 0$ et notons ρ_1 la densité du fluide le plus lourd (situé en dessous) et $\rho_2 < \rho_1$ la densité du deuxième fluide. Le problème considéré dans ce paragraphe est : trouver un champ de vitesse $\vec{u} : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, une pression $p : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ et une fonction level-set $\varphi : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} p = \rho \vec{g} & \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div} \vec{u} = 0 & \text{dans } \Omega, \\ \vec{u} \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = 0 & \text{dans } \Omega. \end{array} \right. \quad (7.1)$$

Nous complétons le problème (7.1) avec les conditions initiales $\vec{u}(0) = (0, 0, 0)^T$ et $\varphi(0) = \varphi_0$. Il est possible de montrer que si l'interface initiale du problème (7.1) est sinusoïdale, l'interface reste une sinusoïde au cours du temps (voir [31], article 231), comme illustré dans la FIGURE 7.1. Dans cette figure, la surface rouge représente l'interface initiale et la surface

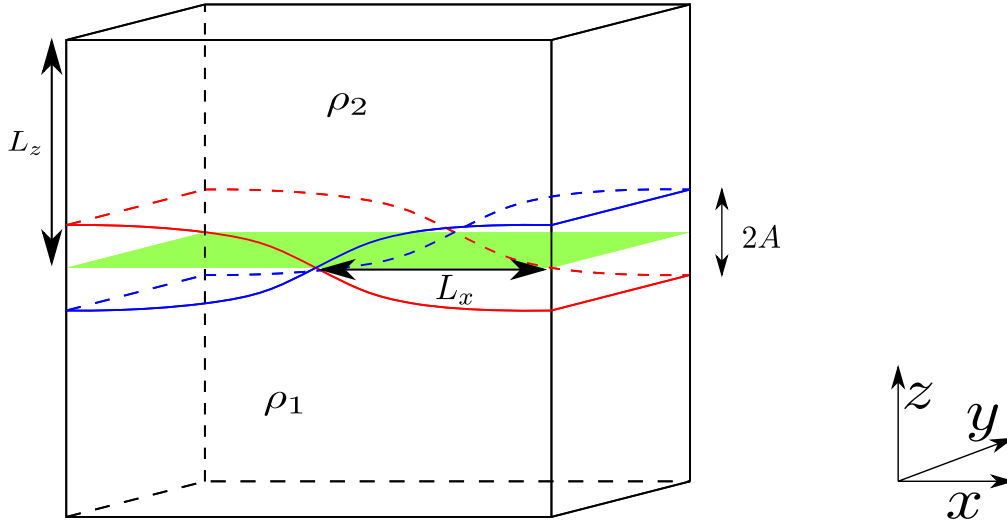


FIGURE 7.1 – Situation physique et notations utilisées.

bleue l'interface après une demi-période. La surface verte représente la position d'équilibre de l'interface.

Plus précisément, soit $A > 0$ l'amplitude de la déformation de l'interface. Nous faisons l'hypothèse que $A \ll L_x$ et $A \ll L_z$. Soit encore $k = \frac{\pi}{2L_x}$ et considérons l'interface initiale

$$\Gamma^0 = \{(x, y, z) \in \Omega : z = A \cos[k(x + L_x)]\}. \quad (7.2)$$

Soit encore φ_0 la fonction level-set associée à Γ^0 . Sous ces conditions, l'interface entre les fluides au temps t est alors donnée par la relation

$$\Gamma(t) = \{(x, y, z) \in \Omega : z = A \cos[k(x + L_x)] \cos(\omega t)\}, \quad (7.3)$$

où ω est défini par la relation

$$\omega^2 = \frac{gk(\rho_1 - \rho_2)}{\rho_1 \coth(kL_z) + \rho_2 \coth(kL_z)}, \quad (7.4)$$

et où g est l'accélération gravifique terrestre (voir [31]). Notons encore que sous ces hypothèses, l'écoulement des fluides est invariant dans la direction Oy . Ainsi, le problème considéré ici est bidimensionnel.

Simulation numérique

Du fait de l'absence de forces de Lorentz dans le problème (7.1), nous résolvons ce dernier en utilisant l'algorithme de la section 4.6 sans faire les étapes liées aux aspects électromagnétiques (découpe des anodes, calcul du potentiel, etc.). De plus, les fluides considérés étant à

viscosité nulle, il est nécessaire d'adapter le schéma (4.10) afin de tenir compte de ce fait. Cela est effectué en ajoutant un terme de stabilisation de type SUPG dans le problème (4.10) et en négligeant le terme visqueux. En reprenant les notations du chapitre 4, le schéma utilisé pour trouver une approximation du champ de vitesse au temps t_{n+1} est : pour $n \in \mathbb{N}$, trouver $\vec{u}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h^n$ et $\tilde{p}_h^{n+1} \in \mathcal{Q}_h^n$ telles que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\vec{u}_h^{n+1} - \vec{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \vec{v}_h + \rho (\vec{u}_h^n \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h - \tilde{p}_h^{n+1} \operatorname{div} \vec{v}_h \right) dx \\ + \sum_{K \in \mathcal{U}_h^n} \int_K \frac{\beta_e h_K}{2 \|\vec{u}_h^n\|_{L^2(K)}} (\vec{u}_h^n \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_h^{n+1} \cdot (\vec{u}_h^n \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}_h dx = \int_{\Omega} \vec{F}_h^{n+1} \cdot \vec{v}_h dx, \\ \int_{\Omega} q_h \operatorname{div} \vec{u}_h^{n+1} dx = 0, \end{cases} \quad (7.5)$$

pour tout $\vec{v}_h \in \mathcal{V}_h^n$, tout $q_h \in \mathcal{Q}_h^n$, où $\beta_e > 0$ est un paramètre de stabilisation. Notons encore que dans (7.5), la pénalisation de Carman-Kozeny a été omise vu que le domaine Ω_s est supposé vide. Ainsi, l'algorithme utilisé pour résoudre le problème (7.1) est celui de la section 4.6, sans les étapes liées au problème électromagnétique, et où le schéma (4.10) est remplacé par le schéma (7.5).

Le domaine Ω considéré pour la résolution numérique de (7.1) est $\Omega = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \times (-\frac{1}{20}, \frac{1}{20}) \times (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Les calculs sont effectués sur un maillage structuré isotrope de paramètre $h > 0$ et avec un pas de temps $\Delta t = 5h$. Nous simulons $T = 60$ [s] d'évolution temporelle du problème (7.1). Les densités utilisées sont celles de l'aluminium et du bain, c'est-à-dire $\rho_1 = 2270$ [kg/m³] et $\rho_2 = 2130$ [kg/m³]. Sous ces hypothèses, la fréquence d'oscillation théorique vaut $\omega_e = 0.948$ [Hz]. Ainsi, la période d'oscillation théorique est $T_e = 6.625$ [s]. Concernant les paramètres de stabilisation, nous avons pris $\beta_e = 2.0$ pour la stabilisation SUPG des équations d'Euler et $\beta = 10^{-2}$ pour la stabilisation SUPG de l'équation de transport de la fonction level-set (voir (4.13)). Ces paramètres ont été calculés de telle sorte qu'une diminution de ceux-ci entraîne des instabilités numériques lors de la résolution numérique du problème (7.1). Le lissage de l'interface est effectué avec des polynômes de degré 5 dans la direction Ox et des polynômes de degré 0 dans la direction Oy . La tolérance géométrique utilisée dans l'algorithme de raffinement de maillage est $\varepsilon_{geom} = 0.0125$ (voir section 3.3.1 pour un rappel de son utilisation). Avec cette valeur, l'interface est capturée de manière précise et les tétraèdres de petit volume sont peu nombreux, comme illustré dans la FIGURE 7.2.

Soit $\Pi = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \times (-\frac{1}{20}, \frac{1}{20})$. Nous rappelons que l'interface $\Gamma(t)$ est le graphe d'une fonction lisse $g : (0, T) \times \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ et soit le plan $z = z_0$ la position d'équilibre de l'interface. Soit encore la fonction $h(t, x, y) = g(t, x, y) - z_0$, où $(x, y) \in \Pi$. Afin de confronter les approches eulérienne et lagrangienne, nous regardons l'évolution temporelle de la fonction $h(t, -\frac{1}{2}, 0)$ trouvée par chacune des approches sur des maillages isotropes structurés de paramètre $h = \frac{1}{20}, \frac{1}{40}$ et $\frac{1}{80}$. Nous obtenons alors les résultats présentés dans les FIGURES 7.3, 7.4 et 7.5.

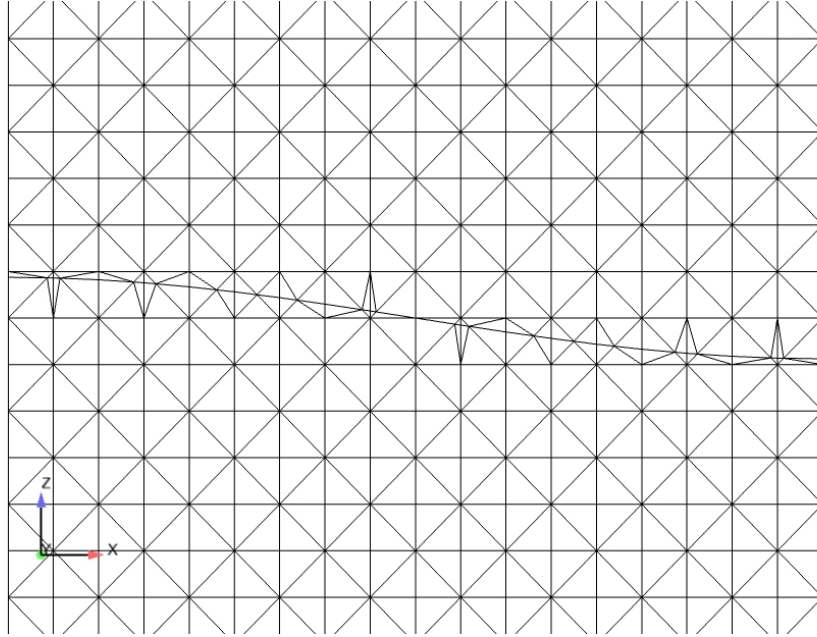


FIGURE 7.2 – Illustration du raffinement de maillage au voisinage de l'interface dans le cas des modes gravitationnels.

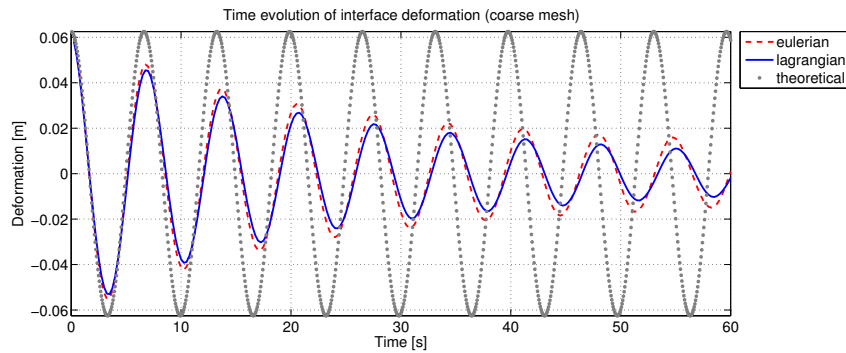


FIGURE 7.3 – Evolution temporelle de l'interface pour les approches eulérienne et lagrangienne sur un maillage de paramètre $h = 0.05$ et pour un pas de temps $\Delta t = 0.25$.

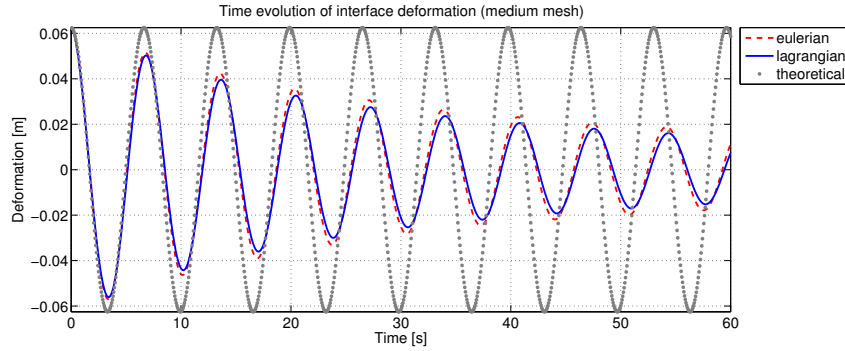


FIGURE 7.4 – Evolution temporelle de l'interface pour les approches eulérienne et lagrangienne sur un maillage de paramètre $h = 0.025$ et pour un pas de temps $\Delta t = 0.125$.

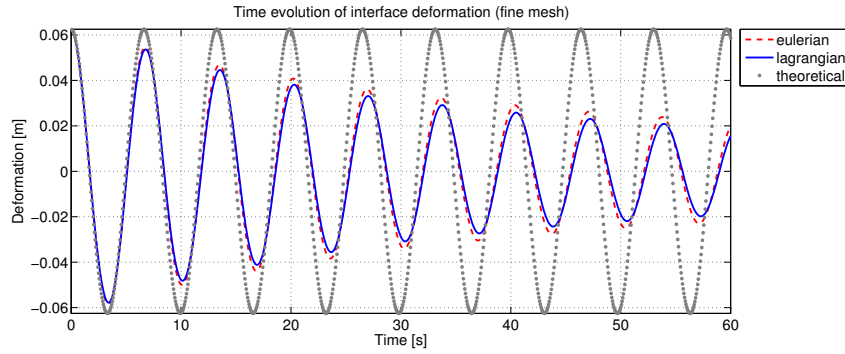


FIGURE 7.5 – Evolution temporelle de l'interface pour les approches eulérienne et lagrangienne sur un maillage de paramètre $h = 0.0125$ et pour un pas de temps $\Delta t = 0.0625$.

Dans toutes ces figures, nous avons mis le graphe de l'évolution temporelle théorique de l'interface afin de visualiser l'erreur produite par chacun des schémas. Nous constatons que la méthode eulérienne développée dans ce document diffuse et disperse légèrement moins que l'approche lagrangienne, et ce sur tous les maillages utilisés. Concernant les périodes d'oscillation de l'interface, nous obtenons les valeurs présentées dans la TABLE 7.1. La période théorique T_e étant de $6.625 [s]$, nous constatons que les valeurs obtenues ne sont éloignées de celle-ci que de 3.9% au maximum. Cela signifie que l'algorithme transitoire de type eulérien de la section 4.6 est bien implémenté, mais également que les paramètres de stabilisation β_e et β ne sont peut-être pas optimaux. Remarquons également que les périodes obtenues par les deux algorithmes sont très proches, quel que soit le maillage utilisé. Ceci provient de la discrétisation temporelle du problème. En effet, dans les cas considérés à la TABLE 7.1, la différence entre les périodes obtenues par les deux approches est plus petite que le pas de temps Δt . Ainsi, afin de comparer l'erreur de dispersion de chacune des méthodes, il est nécessaire de prendre un pas de temps Δt plus petit.

	Eulérien	Lagrangien
$h = 1/20, \Delta t = 0.25$	6.84 [s]	6.88 [s]
$h = 1/40, \Delta t = 0.125$	6.77 [s]	6.80 [s]
$h = 1/80, \Delta t = 0.0625$	6.72 [s]	6.74 [s]

TABLE 7.1 – Périodes d'oscillation obtenues par les approches eulérienne et lagrangienne.

Regardons à présent la convergence en maillage de l'algorithme de la section 4.6. A nouveau, nous étudions l'évolution temporelle de la fonction $h(t, -\frac{1}{2}, 0)$ pour les triangulations utilisées précédemment. Nous obtenons alors les résultats présentés à la FIGURE 7.6. Nous constatons qu'à chaque fois que le maillage est raffiné et que le pas de temps Δt est divisé par deux, le mouvement de l'interface est de moins en moins diffusif et dispersif. Cela montre que l'algorithme développé au paragraphe 4.6 est bien implémenté, mais que les paramètres de stabilisation ne sont peut-être pas optimaux.

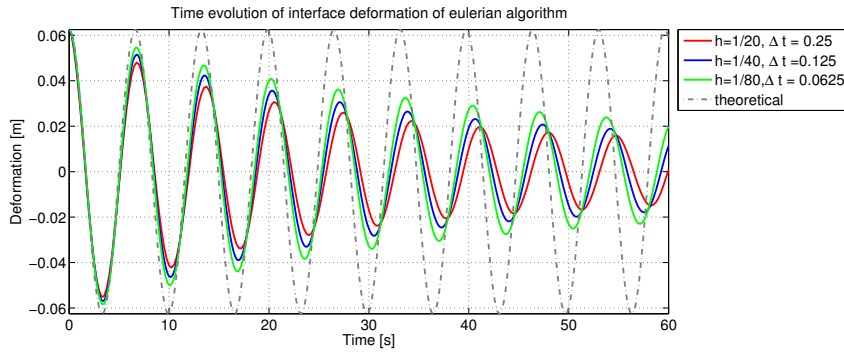


FIGURE 7.6 – Etude en maillage de l'approche eulérienne.

7.1.2 Expérience de Coventry

La compréhension des instabilités de l'interface aluminium-bain présentes dans le processus de Hall-Héroult est d'une grande importance économique. En effet, si l'interface entre les fluides devient instable, cette dernière peut alors toucher les anodes, ce qui entraîne un court-circuit qui peut endommager la structure de la cuve. Afin d'éviter cela, de nombreuses études théoriques ont été menées afin de modéliser et comprendre les instabilités observées dans le processus de Hall-Héroult (voir par exemple [49, 23]). Ces travaux concluent que les instabilités sont principalement dues à l'interaction entre la composante verticale de l'induction \vec{B}_{ext} engendrée par les cuves voisines et la composante horizontale du courant \vec{j} . Cette interaction entraîne une rotation de l'interface qui peut devenir instable sous certaines valeurs du procédé de Hall-Héroult.

Dans la pratique, il est difficile de mesurer l'écoulement des fluides sur une cuve en fonction (et donc les instabilités MHD) à cause de la géométrie de la cuve, de la haute température et de la corrosivité du bain. Cela rend difficile la compréhension du phénomène, ainsi que la

validation des modèles théoriques. L'université de Coventry, en collaboration avec d'autres institutions, a créé une expérience ayant pour objectif de reproduire les instabilités MHD à température ambiante et avec un champ d'induction vertical [42]. C'est cette expérience que nous allons simuler numériquement à l'aide du logiciel ALUCCELL.

La cuve d'électrolyse simplifiée utilisée dans l'expérience de Coventry est la suivante : deux fluides se trouvent dans un parallélépipède à base carrée de $30 \times 30 [cm^2]$ et de $15 [cm]$ de haut. Les fluides présents dans cette cavité sont de l'acide chlorhydrique ainsi qu'un mélange d'étain, de gallium et d'indium qui joue le rôle de l'aluminium liquide et qui reste fluide à température ambiante. Le courant électrique entre par une anode de $15 [mm]$ d'épaisseur et passe ensuite dans 900 électrodes verticales en acier inoxydable mesurant $40 [mm]$ de long et $2 [mm]$ de diamètre. Ces électrodes sont partiellement immergées dans le métal, et sont environ 75 fois moins conductrices que le métal liquide, ce qui permet de reproduire les propriétés électrodynamiques du bain. Une coupe de cette configuration expérimentale est illustrée dans la FIGURE 7.7.

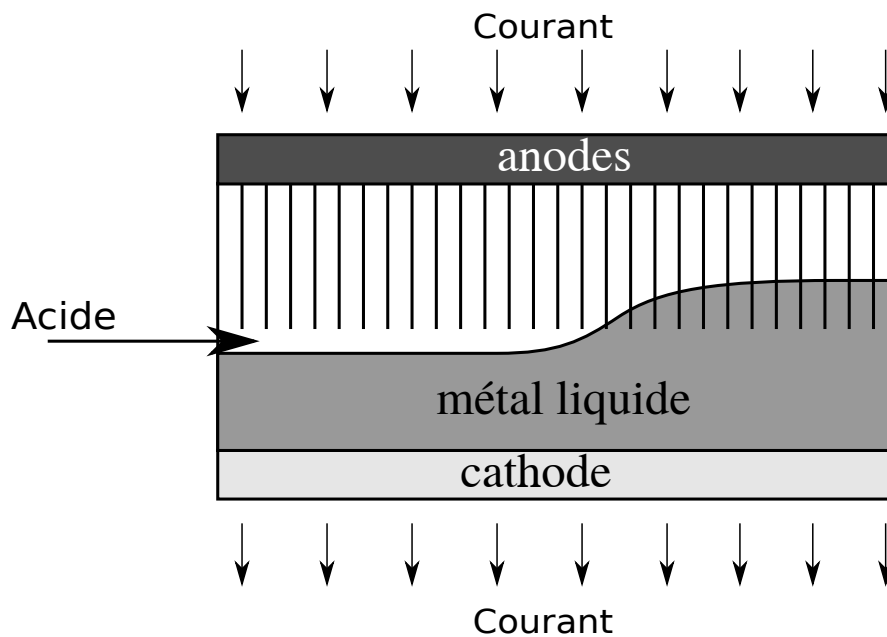


FIGURE 7.7 – Schéma de l'expérience.

L'initialisation de l'expérience est la suivante : les électrodes sont légèrement immergées dans le bain, et l'on fait traverser un courant de $1800 [A]$ dans le circuit, puis les bobines générant le champ d'induction sont enclenchées. L'interface acide-métal se met rapidement à tourner avec une grande amplitude. Une fois le mouvement rotatif mis en place, le courant est abaissé à la valeur désirée pour l'expérience. Si l'amplitude du mouvement de l'interface décroît, la configuration est dite *stable* et si elle se maintient ou augmente, la configuration est dite *instable*.

Paramètres numériques et maillage

Nous reproduisons numériquement l'expérience pour une induction verticale de $10[mT]$ et des courants \mathcal{I} de 550, 600, 650, 700, 750, 800, 850 et 900 $[A]$. Nous simulons $T = 45[s]$ de l'expérience de Coventry, avec un pas de temps $\Delta t = 0.025[s]$, autant pour l'algorithme de la section 4.6 que l'algorithme lagrangien décrit dans [51]. Dans nos reproductions numériques de l'expérience, les électrodes ne sont pas maillées. Afin de tenir compte de l'effet conducteur de celles-ci, nous n'utilisons pas la conductivité électrique réelle de l'acide chlorhydrique, mais celle des électrodes. Cela permet de reproduire le comportement électrodynamique de l'acide observé en laboratoire.

Nous prenons comme interface initiale un plan incliné dont l'écart avec la position d'équilibre est de 12 $[mm]$ au maximum. Afin de mieux reproduire l'expérience, durant les 400 premiers pas de temps, nous résolvons le problème MHD avec un courant de 1800 $[A]$ et une induction verticale de 5 $[mT]$. Une fois ces 400 pas de temps passés, nous continuons la simulation avec le courant et l'induction verticale de l'expérience que nous voulons reproduire.

Les calculs sont effectués sur un maillage structuré, comme illustré dans les FIGURES 7.8 et 7.9. Lors de nos simulations, le maillage utilisé par la méthode de marche temporelle de type lagrangienne développée dans [51] est raffiné au voisinage de l'interface. Ce choix permet de diminuer la diffusion numérique, ainsi qu'une meilleure capture du saut des conductivités électriques lorsque l'interface acide-métal ne touche pas les barres. Dans le cas de l'algorithme de la section 4.6, nous optons pour une triangulation de la cuve où le domaine occupé par les fluides est maillé uniformément dans la direction verticale. Cela nous permet d'éviter des difficultés numériques liées au raffinement de tétraèdres comprimés.

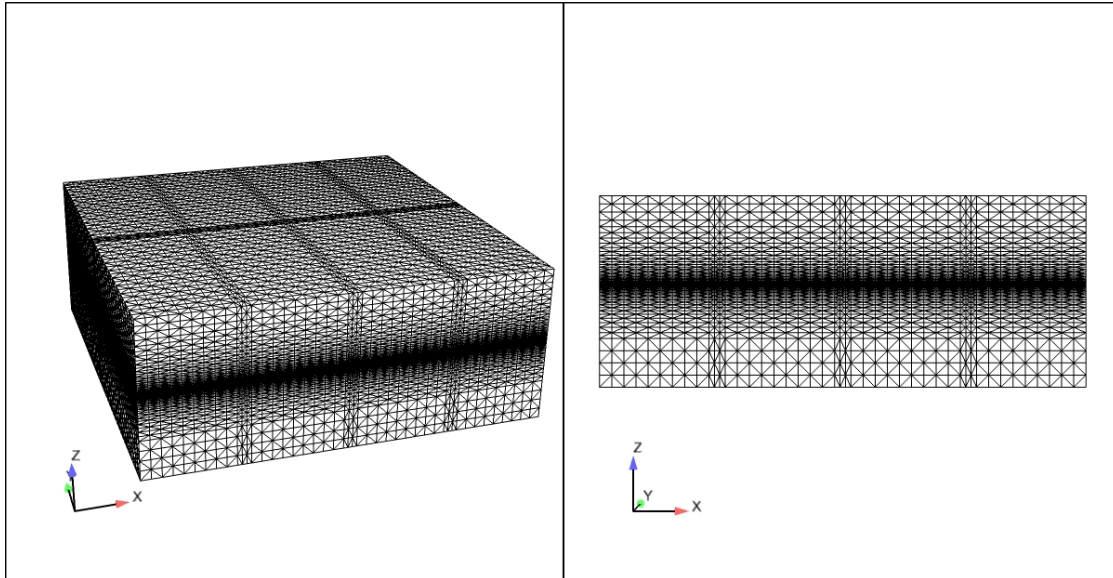


FIGURE 7.8 – Maillage utilisé par l'algorithme évolutif lagrangien [51].

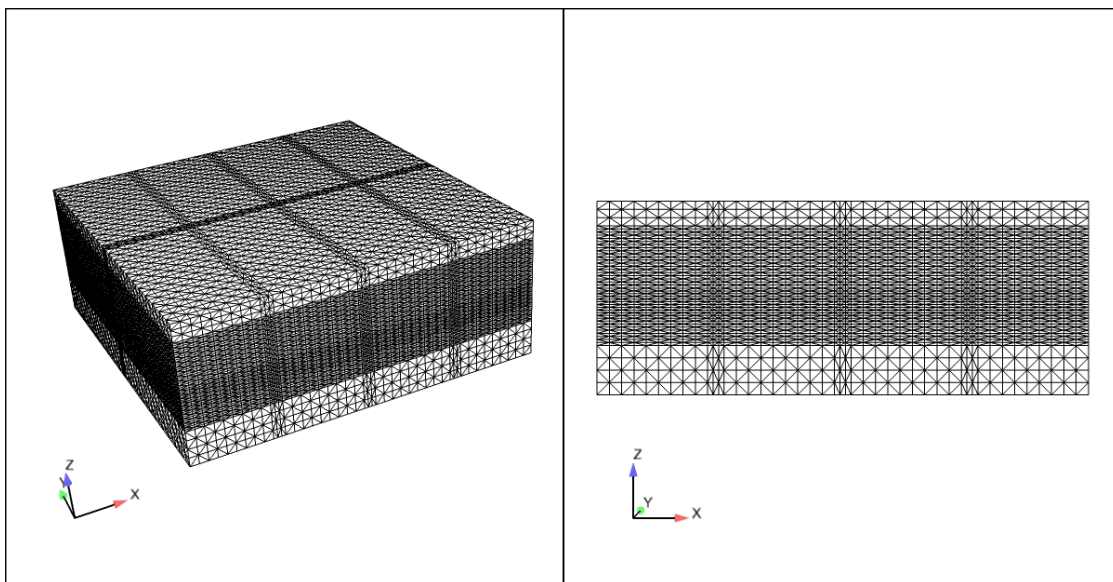


FIGURE 7.9 – Maillage utilisé par l'algorithme évolutif eulérien.

Résultats numériques

Soit z_0 l'altitude de la position d'équilibre de l'interface acide-métal lorsque les forces électromagnétiques sont négligées. Comme l'interface est le graphe d'une fonction lisse, il existe un domaine $\Pi \subset \mathbb{R}^2$ et une fonction $g : (0, T) \times \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\Gamma(t) = \{(x, y, z) \in \Omega : z = g(t, x, y) \text{ où } (x, y) \in \Pi\}.$$

Afin de comparer les deux approches utilisées pour résoudre le problème MHD avec interface libre instationnaire, nous procédons de la manière suivante : nous avons fixé un point P de coordonnées $(x, y) \in \Pi$, et nous regardons l'évolution temporelle de la fonction $h(t) = g(t, x, y) - z_0$. En prenant le point P de coordonnées $(15[cm], 0)$, nous obtenons les résultats des FIGURES 7.10 à 7.17. Nous constatons que l'évolution temporelle de l'interface est quasiment identique pour les approches eulérienne et lagrangienne. Les seules différences se situent dans les pics inférieurs des oscillations, ce qui est particulièrement visible dans la FIGURE 7.17. Notons encore pour un courant \mathcal{I} de 550 ou 600[A], le mouvement de l'interface est stable alors qu'il est instable si \mathcal{I} est supérieure 650[A].

Nous avons constaté dans la section 7.1.1 que l'algorithme transitoire de type eulérien diffuse moins que l'approche lagrangienne. Or, pour l'expérience de Coventry, il n'y a pas de différence significative sur la diffusion numérique générée par les deux approches. Cela provient des maillages utilisés. En effet, dans le cas où le maillage est déformé pour suivre le mouvement de l'interface, nous avons utilisé un maillage raffiné au voisinage de l'interface. Ce choix permet de diminuer la diffusion numérique du schéma lagrangien et d'obtenir quasiment la même évolution temporelle de l'interface que le schéma eulérien.

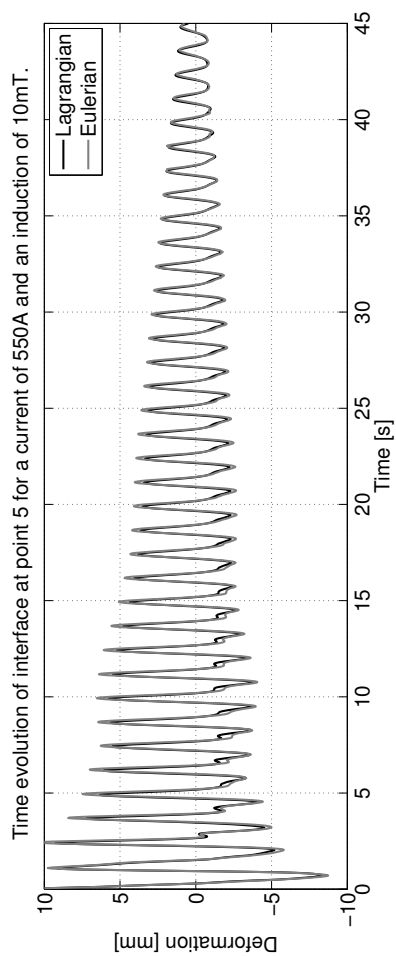


FIGURE 7.10 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 550 [A].

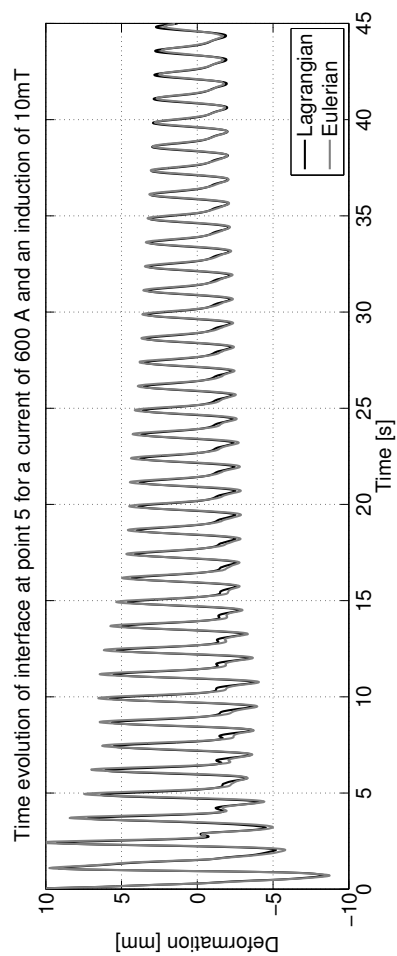


FIGURE 7.11 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 600 [A].

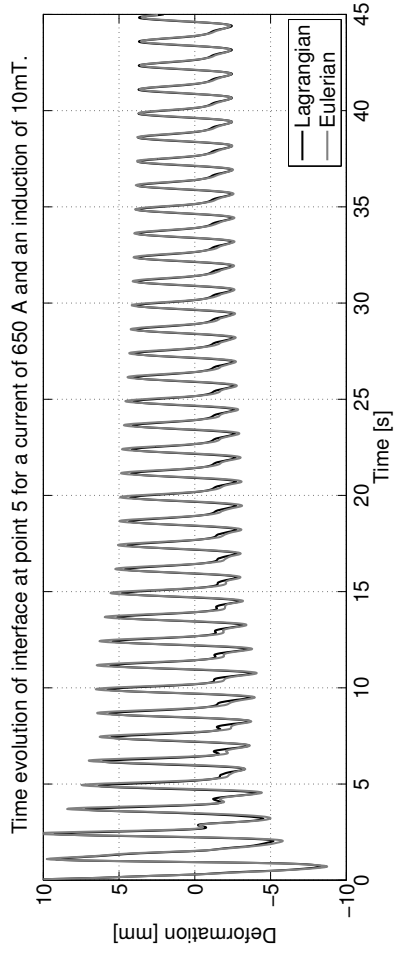


FIGURE 7.12 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 650 [A].

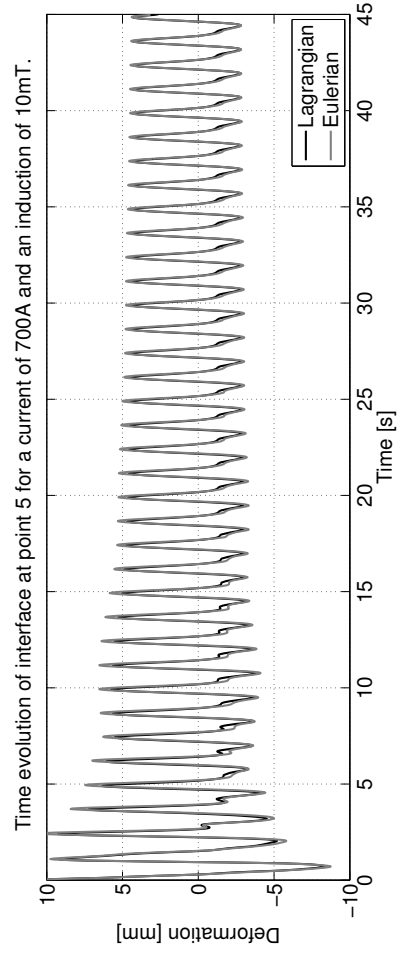


FIGURE 7.13 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 700 [A].

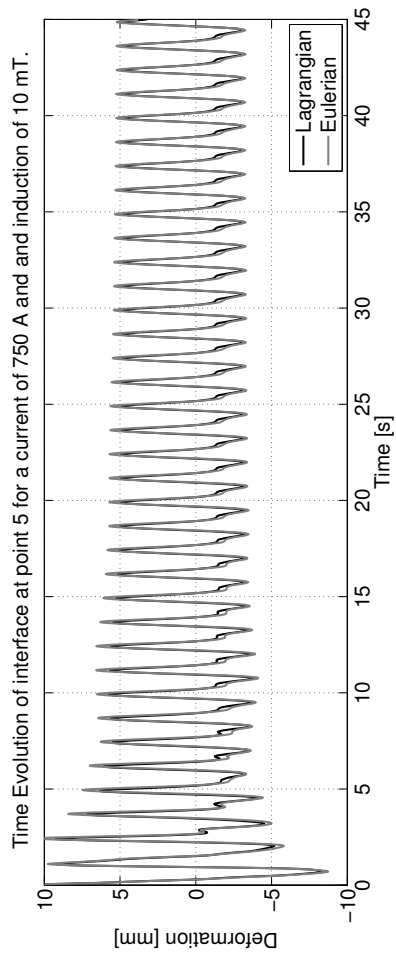


FIGURE 7.14 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 750 [A].

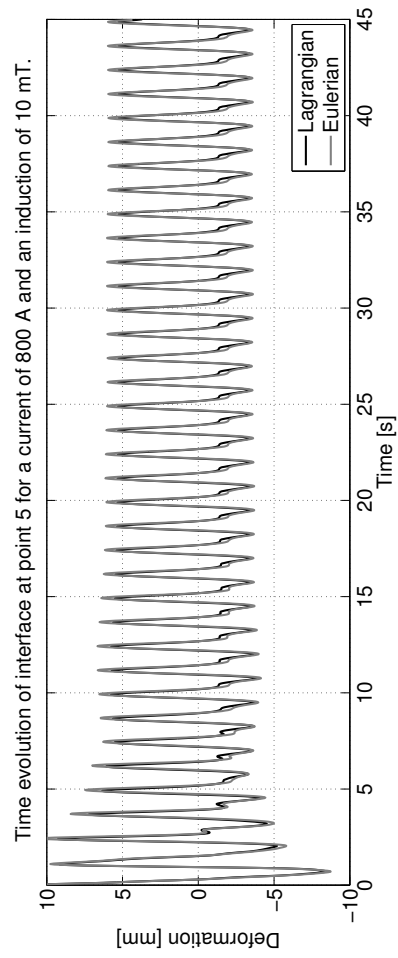


FIGURE 7.15 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 800 [A].

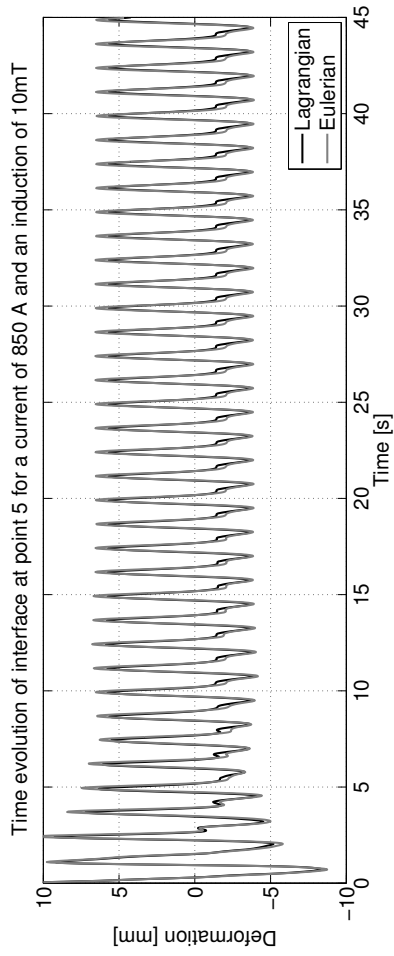


FIGURE 7.16 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 850 [A].

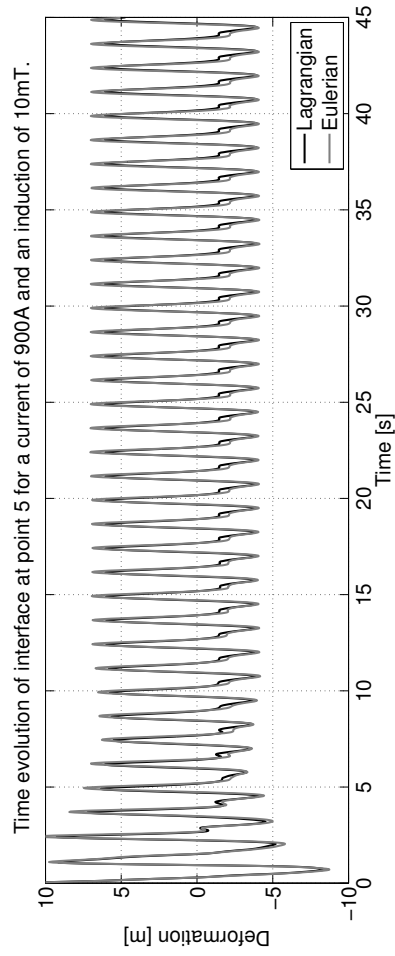


FIGURE 7.17 – Evolution de la déformation de l'interface pour un courant de 900 [A].

Comparaison des résultats obtenus avec l'expérience

Puisque les simulations effectuées reproduisent une situation expérimentale, nous avons la possibilité de comparer les résultats obtenus par les algorithmes transitoires de type eulérien et lagrangien avec les mesures. Lorsque l'écoulement des fluides est instable, les oscillations de l'interface aluminium-bain ne s'amortissent pas. En conséquence, si nous prenons un point P situé sur le fond du domaine occupé par les fluides, nous pouvons calculer la moyenne \bar{h} de l'écart $h(t)$ entre la déformation de l'interface associée au point P et la position d'équilibre de l'interface (le plan $z = z_0$). La grandeur $h(t)$ est illustrée dans la FIGURE 7.18.

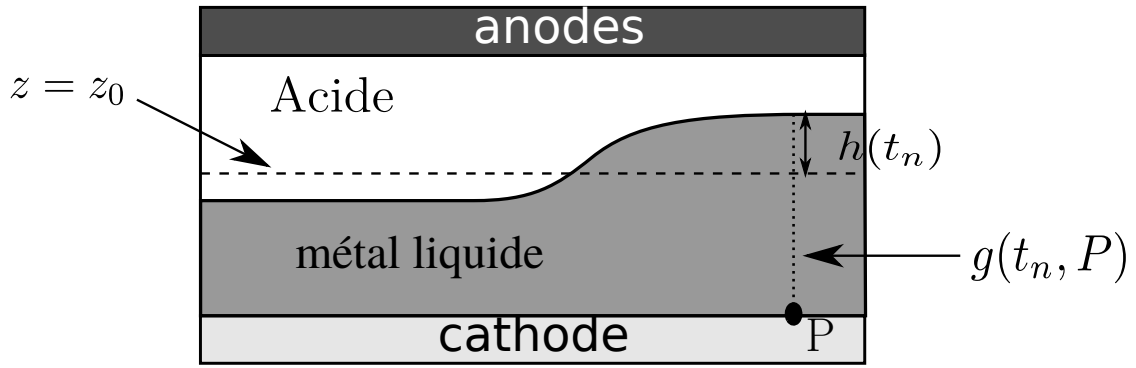


FIGURE 7.18 – Notations utilisées pour la comparaison avec les mesures expérimentales.

Soit P un coin du fond du domaine occupé par les fluides et soit $t_K = K\Delta t$ le temps à partir duquel la quantité \bar{h} est calculée. Soit encore $h(t_n) = g(t_n, P) - z_0$ l'amplitude de la déformation de l'interface pour P au temps t_n , où $n > K$. Nous définissons alors l'estimateur

$$RMS = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{n=1}^N (h(t_{n+K}) - \bar{h})^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

et qui n'est rien d'autre que l'estimateur usuel de l'écart-type de la déformation de l'interface. Dans notre cas, N est tel que le calcul du RMS est effectué sur 15 périodes d'oscillations. Nous obtenons alors les résultats présentés dans la FIGURE 7.19.

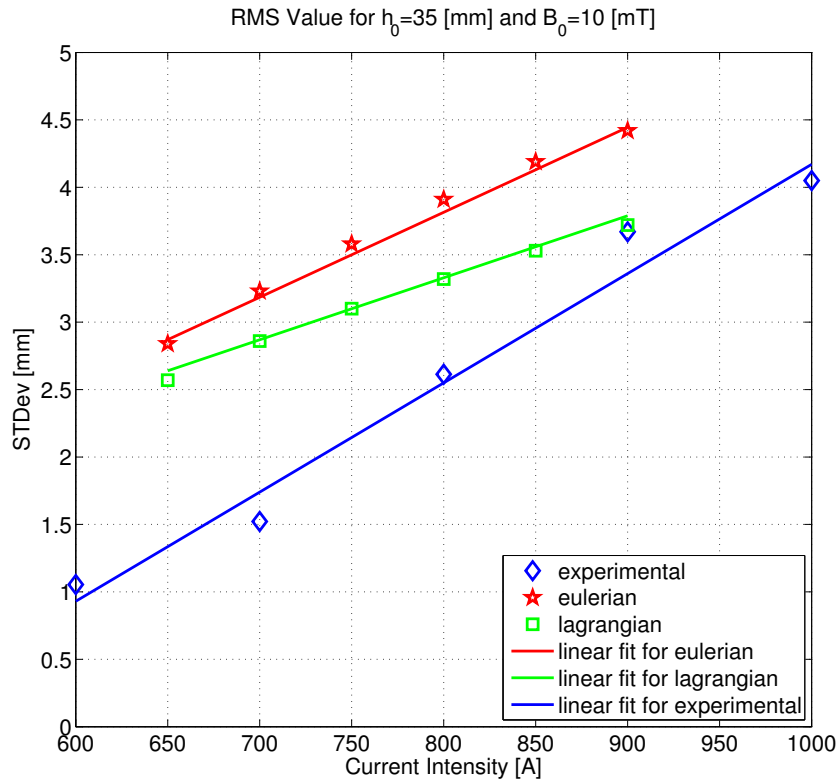


FIGURE 7.19 – RMS pour l'expérience de Coventry.

Autant pour l'algorithme transitoire de type eulérien que l'algorithme transitoire de type lagrangien, la valeur du RMS en fonction du courant \mathcal{I} traversant la cuve est plus élevée que les mesures expérimentales. Cela est dû au fait que l'amplitude de la déformation de l'interface est plus grande dans nos simulations numériques que dans l'expérience, car nous ne modélisons pas les 900 tiges immergées dans l'acide. En effet, la présence de celles-ci augmente les frottements, ce qui diminue l'amplitude de la déformation de l'interface.

Néanmoins, en observant les régressions linéaires associées aux mesures et aux résultats numériques, nous constatons que la pente de la régression associée à l'approche eulérienne est plus proche de celle associée aux mesures expérimentales que la pente de la régression linéaire associée à l'algorithme transitoire de type lagrangien. Ainsi, pour cette expérience, la méthode présentée à la section 4.6 permet de mieux récupérer les comportements observés en laboratoire que l'approche lagrangienne utilisée jusqu'à maintenant.

7.1.3 Cuve numérique

Nous comparons à présent les solutions stationnaires du problème MHD avec interface libre obtenues par les approches eulérienne et lagrangienne. Dans un premier temps, les calculs sont effectués sur une cuve d'électrolyse simplifiée, appelée *cuve numérique*. Cette cuve a été créée par G. Steiner dans le cadre de ses travaux sur l'évolutif de type lagrangien (voir [51]). L'utilisation de cette cuve simplifiée permet de reproduire le comportement du couplage MHD avec interface libre d'une cuve industrielle avec un temps de calcul moindre. Une illustration de cette géométrie se trouve dans la FIGURE 7.20. Notons encore que la cuve numérique n'a pas d'isolants thermiques autour du domaine occupé par les fluides.

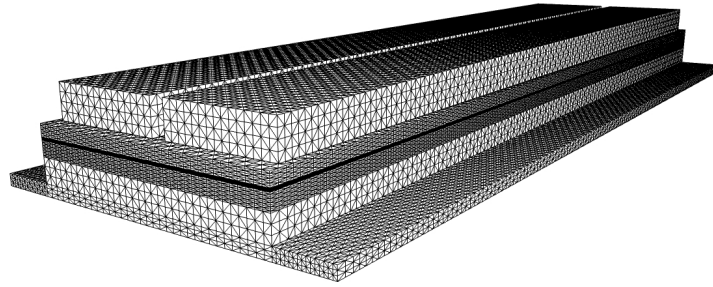


FIGURE 7.20 – Géométrie utilisée pour les calculs d'interfaces stationnaires.

Afin de simplifier le problème, nous prenons un champ d'induction vertical et nous supposons que le domaine solide Ω_s est vide (simulation sans talus). Nous simulons $T = 500[s]$ du problème MHD avec interface bain-métal libre, avec un pas de temps $\Delta t = 1[s]$. Comme nous cherchons la solution stationnaire, nous actualisons la déformation du plan anodique à chaque pas de temps, comme expliqué dans l'algorithme du paragraphe 4.6. Les valeurs du courant \mathcal{I} et de l'induction \vec{B} utilisées pour nos calculs de solutions stationnaires sont $\mathcal{I} = 300'000$ ou $400'000 [A]$ et $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ avec $B_z = 10, 20$ ou $30 [G]$.

Nous obtenons alors les résultats présentés dans les FIGURES 7.21 à 7.28. Dans toutes ces figures, l'image du haut représente les résultats obtenus par l'algorithme de la section 4.6, et celle du bas ceux obtenus par l'algorithme transitoire de type lagrangien. Dans les FIGURES 7.21 à 7.26, l'interface est colorée en fonction de son écart par rapport à la position d'équilibre. Nous avons ajouté des courbes de niveau afin de mieux visualiser la déformation de l'interface. Nous constatons alors que les interfaces stationnaires obtenues par les deux approches sont très similaires. Notons encore que dans la FIGURE 7.21, il semble y avoir une différence importante entre les deux interfaces. Cela est dû à un effet de la visualisation, car la frontière aluminium-bain est quasiment plate, l'écart entre la déformation de l'interface et la position d'équilibre variant entre $-5 [mm]$ et $12 [mm]$. Ainsi de petites variations de la surface engendrent de grandes variations sur les courbes de niveaux. Dans les FIGURES

7.27 et 7.28, nous avons tracé les lignes de courant engendrées par le champ de vitesse stationnaire. Celles-ci sont colorées en fonction de l'intensité du champ de vitesse, en $[m/s]$. Nous constatons alors que les écoulements stationnaires obtenus par les deux approches sont très semblables.

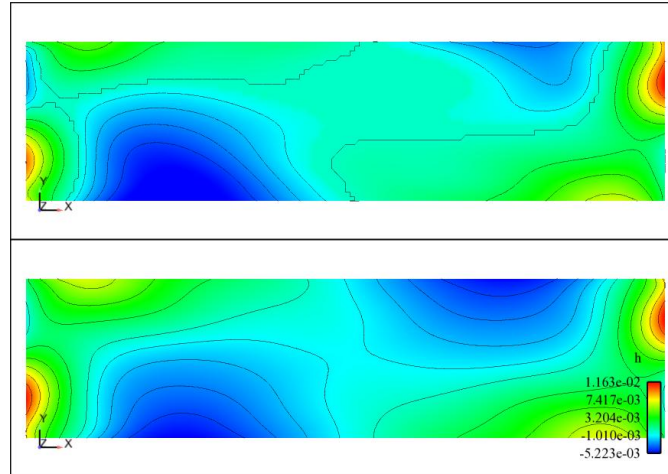


FIGURE 7.21 – Interface stationnaire pour un courant de 300'000 Ampères et une induction verticale de 10 Gauss.

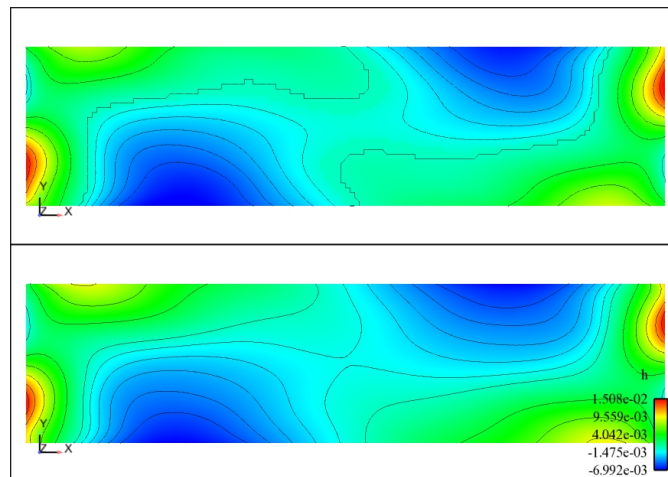


FIGURE 7.22 – Interface stationnaire pour un courant de 400'000 Ampères et une induction verticale de 10 Gauss.

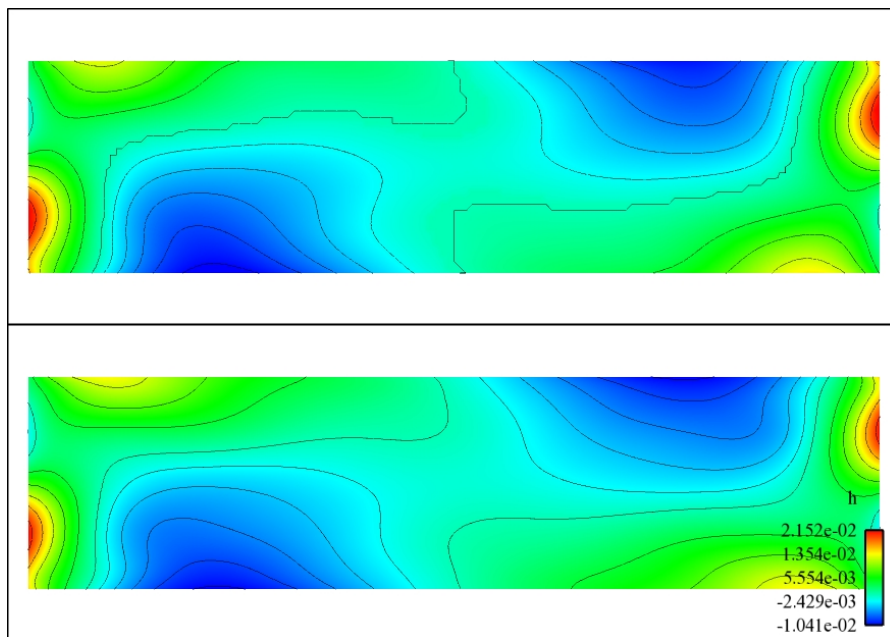


FIGURE 7.23 – Interface stationnaire pour un courant de 300'000 Ampères et une induction verticale de 20 Gauss.

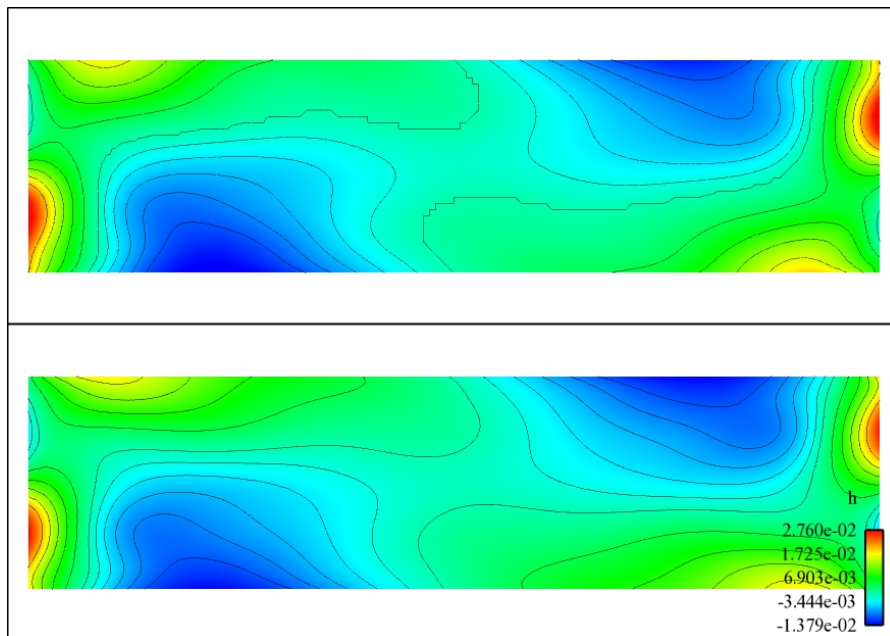


FIGURE 7.24 – Interface stationnaire pour un courant de 400'000 Ampères et une induction verticale de 20 Gauss.

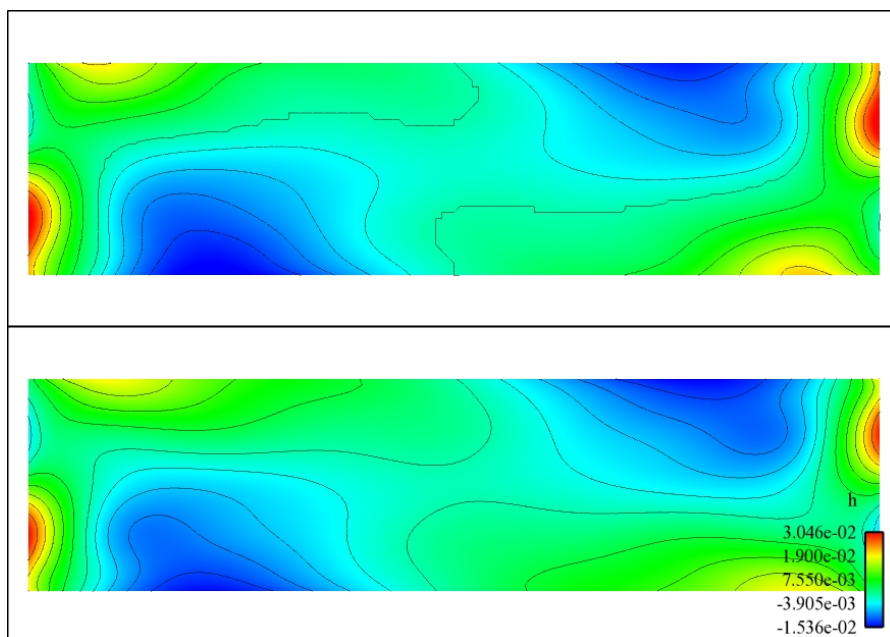


FIGURE 7.25 – Interface stationnaire pour un courant de 300'000 Ampères et une induction verticale de 30 Gauss.

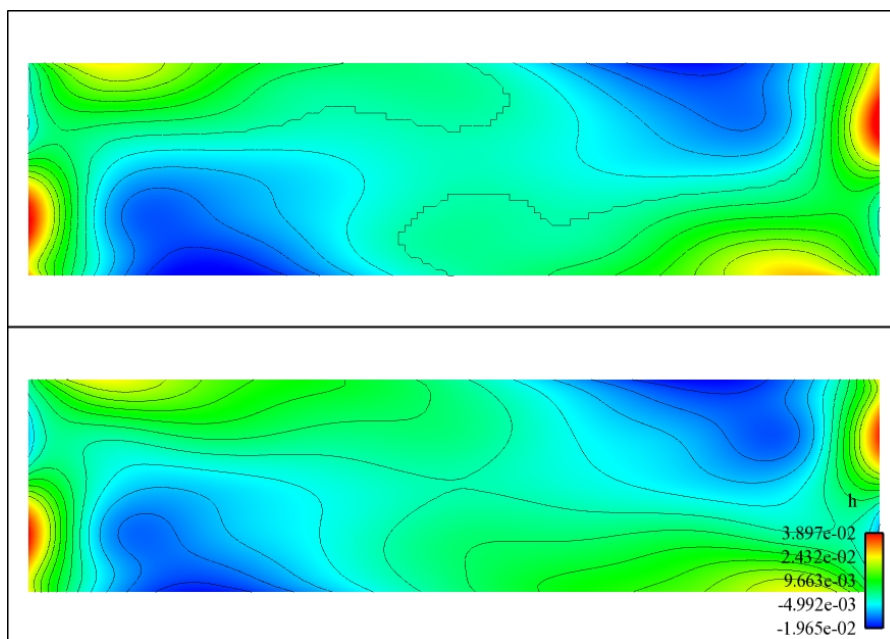


FIGURE 7.26 – Interface stationnaire pour un courant de 400'000 Ampères et une induction verticale de 30 Gauss.

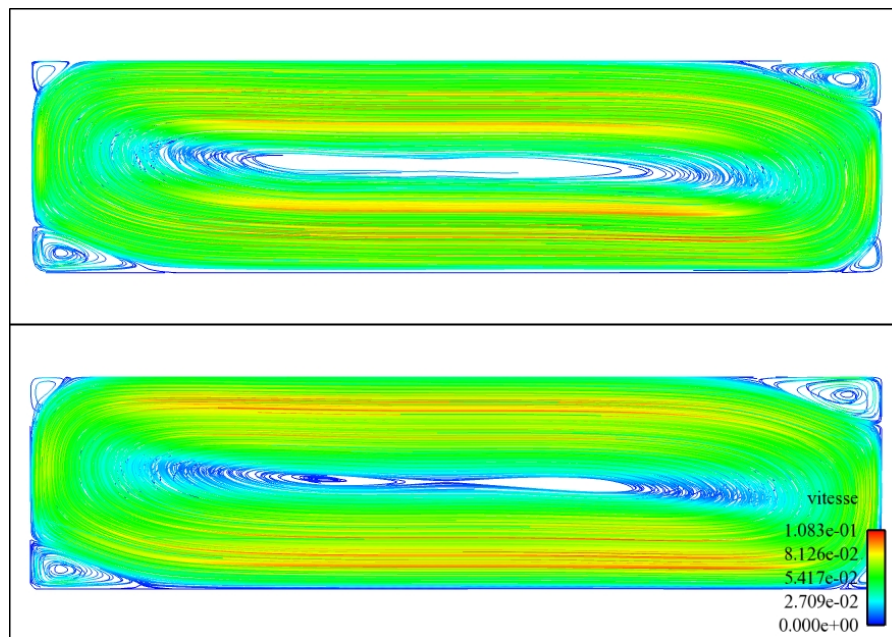


FIGURE 7.27 – Ecoulement stationnaire des fluides pour un courant de 300'000 Ampères et une induction verticale de 10 Gauss.

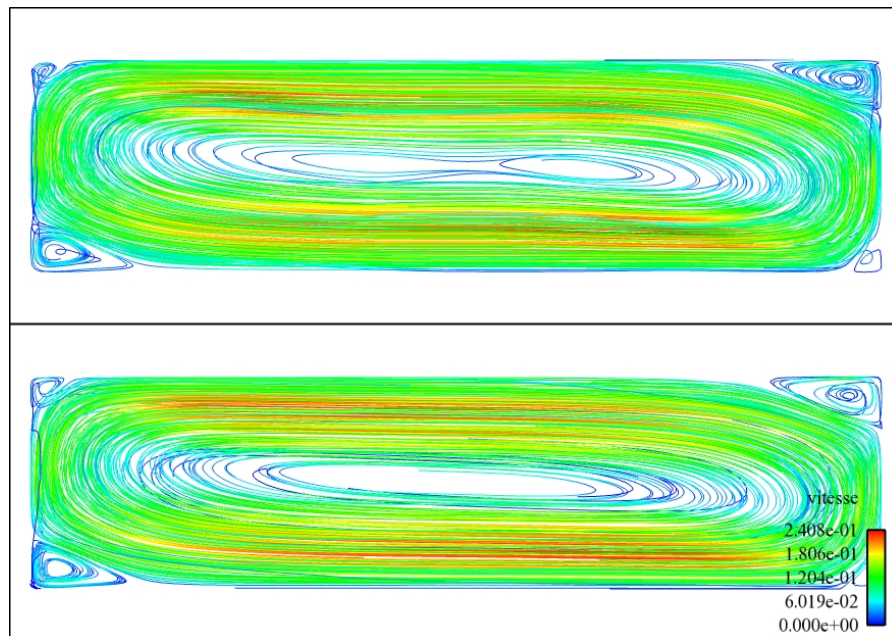


FIGURE 7.28 – Ecoulement stationnaire des fluides pour un courant de 400'000 Ampères et une induction verticale de 30 Gauss.

Soit V^i, \vec{u}^i et g^i , $i = e, l$ le potentiel, le champ de vitesse et la fonction g de la relation (2.1) obtenus par les algorithmes eulérien et lagrangien lorsque ceux-ci ont convergé vers une solution stationnaire. Afin de comparer numériquement les résultats obtenus, nous utilisons les estimateurs

$$\Delta V = \frac{\|V^e - V^l\|_{L^2(\Lambda)}}{\|V^l\|_{L^2(\Lambda)}} \quad (7.6)$$

pour le potentiel,

$$\Delta \vec{u} = \frac{\|\vec{u}^e - \vec{u}^l\|_{L^2(\Omega)}}{\|\vec{u}^l\|_{L^2(\Omega)}} \quad (7.7)$$

pour le champ de vitesse, et

$$\Delta \Gamma = \frac{\|g^e - g^l\|_{L^2(\Pi)}}{\|g^l\|_{L^2(\Pi)}} \quad (7.8)$$

pour l'interface. Nous obtenons alors les résultats présentés dans la TABLE 7.2.

Estimateur	ΔV (en %)			$\Delta \vec{u}$ (en %)			$\Delta \Gamma$ (en %)		
$\mathcal{I} \setminus B_z$	10[G]	20[G]	30[G]	10[G]	20[G]	30[G]	10[G]	20[G]	30[G]
300'000[A]	0.36	0.33	0.73	3.50	3.81	5.26	0.56	0.53	1.19
400'000[A]	0.22	0.51	0.98	3.05	4.73	6.18	0.33	0.83	1.60

TABLE 7.2 – Comparaison numérique des solutions stationnaires obtenues.

En observant cette table, nous constatons que l'écart entre les solutions stationnaires obtenues par les deux approches est faible. En effet, l'écart est inférieur à 2% sur le potentiel et l'interface et plus petit que 6% sur le champ de vitesse. Ceci montre que l'algorithme de la section 4.6 retrouve les solutions stationnaires de l'approche lagrangienne utilisée jusqu'à présent dans ALUCCELL.

7.1.4 Cuve industrielle simplifiée

Nous terminons la validation de notre algorithme transitoire de type eulérien par une étude des résultats obtenus par ce dernier sur une cuve industrielle simplifiée (voir FIGURE 7.29 pour un exemple de géométrie). Le transitoire étant déjà validé, seule la solution stationnaire sera étudiée ici. Nous rappelons que le domaine Ω_s est supposé vide afin de pouvoir comparer les résultats obtenus par l'approche eulérienne avec ceux donnés par l'algorithme transitoire de type lagrangien. Les isolants entourant les fluides ne sont pas pris en compte dans cette dernière validation, car leur présence entraîne des difficultés numériques pour l'approche lagrangienne (voir section 3.1).

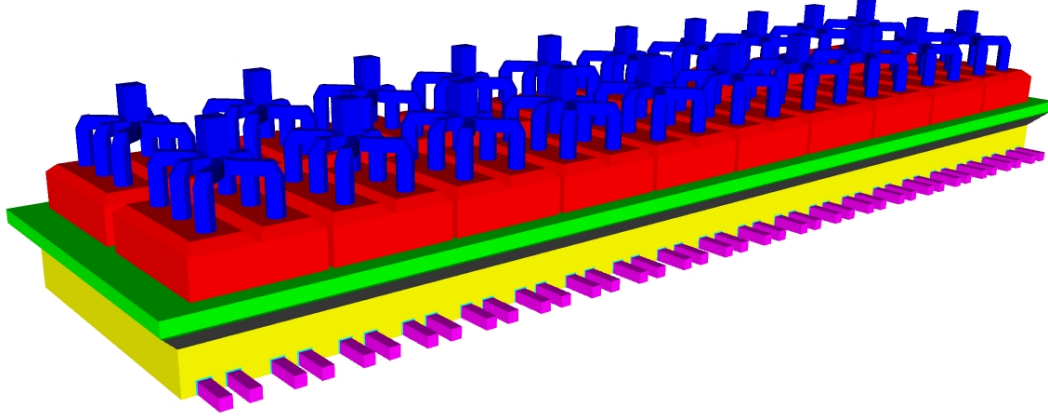


FIGURE 7.29 – Exemple de géométrie utilisée.

Pour simplifier, nous supposons que le champ d'induction \vec{B} est connu pour tout t et que celui-ci correspond à une interface aluminium-bain horizontale. Nous faisons également l'hypothèse que \vec{B} est la superposition des champs d'inductions \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} , où \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} sont les champs d'inductions générés par la cuve, les cuves voisines et le caisson ferromagnétique respectivement. L'intensité \mathcal{I} du courant traversant la cuve est de $360[kA]$ et l'induction magnétique \vec{B} a été calculée avec la densité de courant \vec{j} correspondante. Comme pour la cuve numérique, nous simulons l'évolution temporelle avec $T = 500[s]$ et un pas de temps $\Delta t = 1[s]$. La déformation des anodes pour garder l'ACD constante est faite à chaque pas de temps. Nous obtenons alors les résultats présentés dans les FIGURES 7.30 et 7.31. A chaque fois, l'image du haut (resp. bas) représente les résultats obtenus par l'approche eulérienne (resp. lagrangienne).

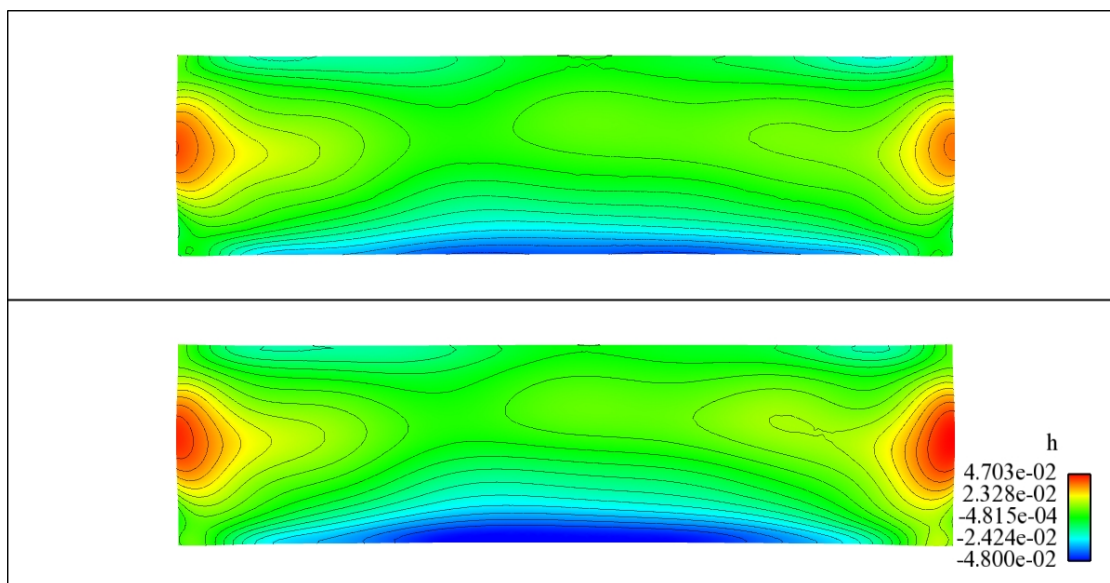


FIGURE 7.30 – Interfaces stationnaires sur une cuve industrielle simplifiée.

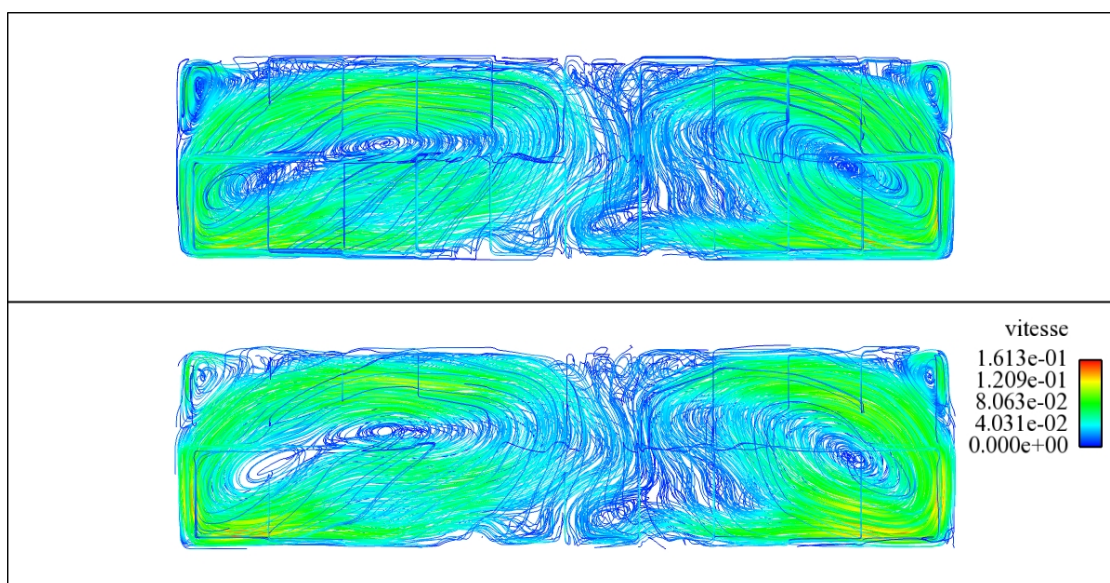


FIGURE 7.31 – Ecoulement stationnaire des fluides dans une cuve industrielle simplifiée.

Dans la FIGURE 7.30 nous avons coloré l'interface en fonction de l'écart entre la déformation de l'interface et sa position d'équilibre lorsque les forces électromagnétiques sont négligées et nous avons ajoutés des courbes de niveau afin de mieux visualiser la déformation. Nous constatons alors que les interfaces stationnaires obtenues par les deux approches sont très proches, autant dans la forme que dans l'amplitude de la déformation. La principale différence entre ces deux frontières bain-métal tient à l'amplitude de la déformation. En effet, cette dernière est plus faible pour l'interface stationnaire obtenue par l'algorithme du paragraphe 4.6 que celle trouvée par l'approche lagrangienne, ce qui semble contradictoire avec les résultats de la section 7.1.1. Ce paradoxe est très certainement dû à la méthode utilisée pour lisser l'interface. En effet, l'interface obtenue par l'algorithme eulérien du paragraphe 4.6 possède environ 4 fois plus de nœuds que l'interface de l'algorithme lagrangien (plus précisément, il y a 19'000 nœuds et 4500 sommets respectivement). Cela a pour effet que les nœuds situés au milieu de l'interface ont plus d'influence sur le lissage que ceux situés au bord de celle-ci. Ainsi, l'amplitude de la déformation de l'interface sur les bords du domaine fluide est diminuée. Néanmoins, nous tenons à souligner que ces différences d'amplitude sont faibles ($< 10\%$) et locales, et que les interfaces stationnaires sont quasiment identiques.

En observant la FIGURE 7.31, qui représente les lignes de courant des champs de vitesse stationnaire, nous constatons que les écoulements stationnaires obtenus par les deux approches sont très similaires. En effet, les grandes structures sont les mêmes, tout comme les petites structures se trouvant dans les coins ou à la rencontre des deux tourbillons principaux.

Nous allons maintenant chiffrer les écarts sur les solutions stationnaires obtenues par les deux algorithmes. Pour ce faire, nous reprenons les estimateurs (7.6), (7.7) et (7.8) utilisés pour comparer les solutions stationnaires sur la cuve numérique. Nous obtenons alors les résultats de la TABLE 7.3.

Estimateur	ΔV	$\Delta \vec{u}$	$\Delta \Gamma$
Valeur (en %)	1.96	11.2	2.03

TABLE 7.3 – Comparaison numérique de la solution stationnaire sur une cuve industrielle simplifiée.

La TABLE 7.3 indique que les résultats obtenus par les deux approches sont voisins, autant pour le potentiel que pour l'interface. Néanmoins, l'écart est plus important sur le champ de vitesse. Cela provient de la méthode du paragraphe 3.4.1 utilisée pour maintenir l'ACD constante. En effet, les bords verticaux des anodes ne sont plus des plans, comme illustré dans la FIGURE 7.32, alors que c'est le cas pour l'approche lagrangienne. Cette différence modifie fortement l'écoulement dans les canaux. En effet, sur la partie de l'anode qui n'est pas un plan, nous imposons des conditions d'adhérence pour la vitesse alors que nous imposons des conditions de glissement si le bord vertical est plan. Cela n'est pas visible dans la FIGURE 7.31, car les lignes de courant que nous avons tracées ne passent pas par les canaux. Il faut noter que si l'on s'intéresse au champ de vitesse dans les canaux, l'approche proposée dans ce document n'est pas optimale, car elle ne conserve pas la géométrie des canaux. L'approche lagrangienne est préférable si l'on désire avoir un champ de vitesse précis dans ceux-ci.

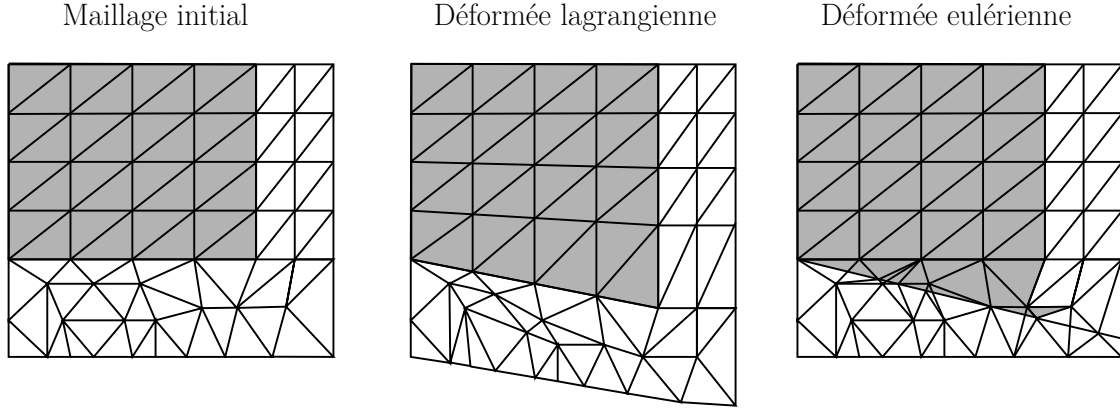


FIGURE 7.32 – Comportement de la déformation des anodes dans les canaux. La zone grisée représente à chaque fois les anodes.

7.1.5 Modes gravitationnels avec talus

Nous avons montré dans les sections précédentes que les résultats instationnaires et stationnaires obtenus par l'algorithme de la section 4.6 sont ceux escomptés lorsque le domaine solide Ω_s est vide (sans talus). Nous relaxons maintenant cette hypothèse. Ainsi, nous supposons que le domaine Ω_s est non vide dans la suite de ce document, sauf mention explicite du contraire.

Nous pouvons dès lors valider numériquement notre algorithme d'extension de la déformation de l'interface dans les talus développé au paragraphe 4.4.3. Ce contrôle est effectué sur une situation physique semblable à celle de la section 7.1.1. Plus précisément, nous simulons l'évolution temporelle de deux fluides immiscibles soumis uniquement à la force de gravité, mais avec une solidification de ceux-ci sur les bords latéraux du domaine, comme illustré dans la FIGURE 7.33. Nous considérons le parallélépipède $\Omega = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \times (-\frac{1}{20}, \frac{1}{20}) \times (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ainsi que le domaine $\Omega_s \subset \Omega$ défini par

$$\Omega_s = \{(x, y, z) \in \Omega : |x| \geq 0.45\}.$$

Soit $\vec{x} \in \Omega$. La fraction liquide associée à Ω_{liq} est définie par $f_l(\vec{x}) = 1.0$ si $|x| < 0.45$ et 0 sinon. Soit encore $T > 0$ un temps d'arrêt. Le problème considéré dans cette partie du document est : trouver des fonctions $\vec{u} : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, $p : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ et $\varphi : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ telles que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla}p + K_\varepsilon \vec{u} = \rho \vec{g} & \text{dans } \Omega \\ \text{div } \vec{u} = 0 & \text{dans } \Omega, \\ \vec{u} \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = 0 & \text{dans } \Omega, \end{array} \right. \quad (7.9)$$

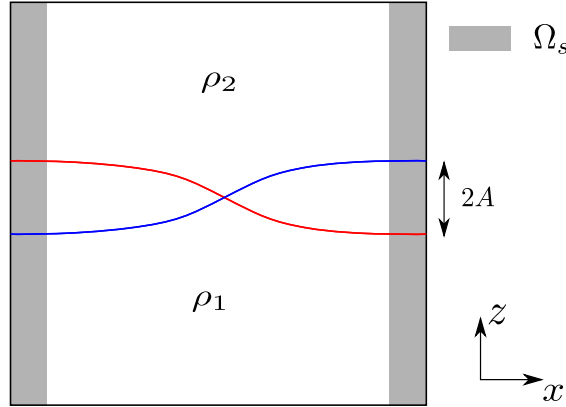


FIGURE 7.33 – Illustration de la situation physique considérée.

où K_ε est le terme de pénalisation de Carman-Kozeny défini par la relation (2.5), avec $\varepsilon = 10^{-2}$ et $\frac{C_\mu}{P^2} = 10$. Le problème est complété avec les conditions initiales $\vec{u}_0 = \vec{0}$ et

$$\varphi_0(\vec{x}) = z - \cos(\pi(x + 0.5)) \quad \forall \vec{x} \in \Omega.$$

Le schéma numérique utilisé pour résoudre le problème (7.9) est celui de la section 7.1.1, en l'adaptant pour tenir compte des zones solides. Cela est effectué en ajoutant le terme de Carman-Kozeny dans le schéma (7.5) ainsi qu'en utilisant la méthode 4.4.3 pour prolonger la déformation de l'interface dans le domaine Ω_s .

Comme au paragraphe 7.1.1, nous prenons les densités $\rho_1 = 2270 [kg/m^3]$ et $\rho_2 = 2130 [kg/m^3]$ qui sont celles de l'aluminium et du bain respectivement. La partie Γ_{liq} de l'interface se trouvant dans le domaine liquide $\Omega_{liq} = \Omega \setminus \Omega_s$ est lissée avec des polynômes de degré 5 dans la direction Ox et des polynômes de degré 0 dans la direction Oy . La tolérance géométrique utilisée pour le raffinement du maillage est $\varepsilon_{geom} = 0.0125$. Concernant les paramètres de stabilisation SUPG, nous avons pris $\beta_e = 2.0$ pour la résolution des équations d'Euler et $\beta = 10^{-2}$ pour le transport de la fonction level-set. La résolution numérique du problème (7.9) est effectuée sur des maillages structurés isotropes de paramètres $h = \frac{1}{20}, \frac{1}{40}$ et $\frac{1}{80}$. Comme pour les modes gravitationnels avec un domaine Ω_s vide, nous prenons comme pas de temps $\Delta t = 5h$ et nous simulons $T = 60[s]$ d'évolution temporelle du problème (7.9).

Soit $\Pi = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \times (-\frac{1}{20}, \frac{1}{20})$. Nous rappelons que l'interface $\Gamma(t)$ est le graphe d'une fonction lisse $g : (0, T) \times \Pi \rightarrow \mathbb{R}$ et soit $z = z_0$ la position d'équilibre de l'interface. Soit encore la fonction $h(t, x, y) = g(t, x, y) - z_0$, où $(x, y) \in \Pi$. Pour chaque maillage, nous regardons l'évolution temporelle de la fonction h pour les points $(-\frac{1}{2}, 0)$ et $(-\frac{1}{4}, 0)$ du domaine Π . La FIGURE 7.35 représente l'évolution temporelle de la fonction $h(t, -\frac{1}{2}, 0)$ pour différentes triangulations du domaine Ω . Le point $(-\frac{1}{2}, 0)$ faisant partie du domaine Π_s^{n+1} , défini à la section 4.4.2, la FIGURE 7.35 illustre l'évolution temporelle de la portion de l'interface se trouvant dans le domaine Ω_s . La FIGURE 7.34 représente l'évolution temporelle

de $h(t, -\frac{1}{4}, 0)$ pour différentes triangulations du domaine Ω . Le sommet $(-\frac{1}{4}, 0)$ se trouvant dans Π_{liq}^{n+1} , la FIGURE 7.34 illustre l'évolution temporelle de l'interface dans la partie liquide du domaine Ω .

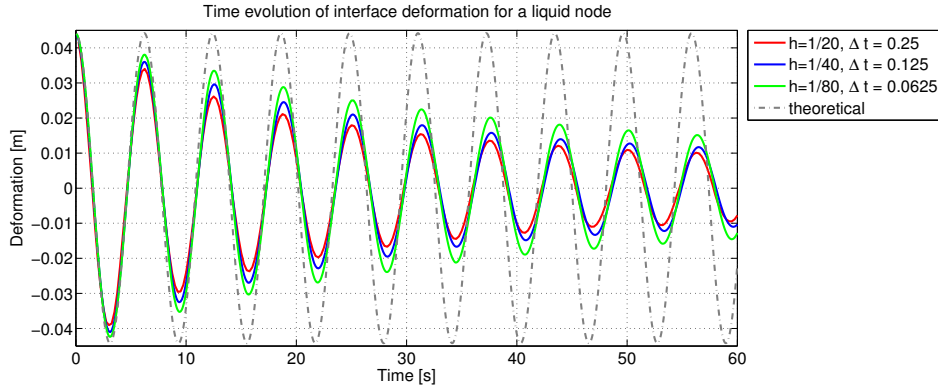


FIGURE 7.34 – Convergence en maillage pour la partie de l'interface se trouvant dans le domaine Ω_{liq} .

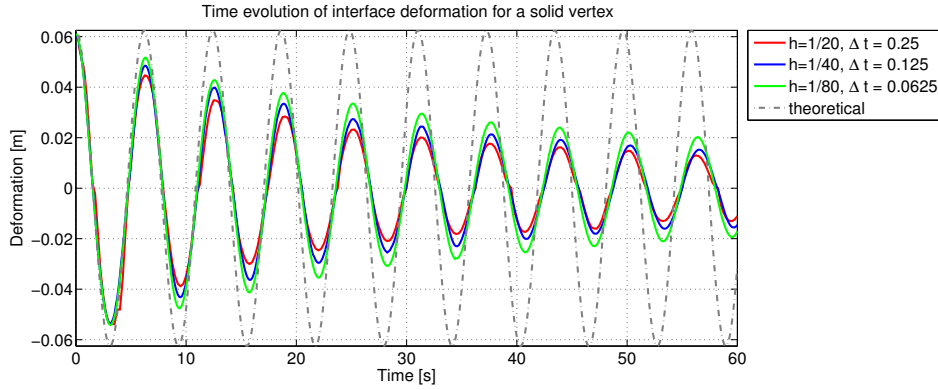


FIGURE 7.35 – Convergence en maillage pour la partie de l'interface se trouvant dans le domaine Ω_s .

Tout d'abord, notons que la FIGURE 7.35 démontre que l'algorithme développé au paragraphe 4.4.3 pour étendre la déformation de l'interface dans le domaine Ω_s permet effectivement à celle-ci de se déplacer dans les zones solides. La continuité de l'interface entre les fluides est également préservée, comme illustré dans la FIGURE 7.36, où les zones solides sont représentées en bleu et le domaine liquide en rouge. De plus, la méthode de la section 4.4.3 permet d'avoir le même comportement de l'interface dans le domaine Ω_s que dans la partie liquide de Ω . Comme au paragraphe 7.1.1, nous constatons que si le paramètre de

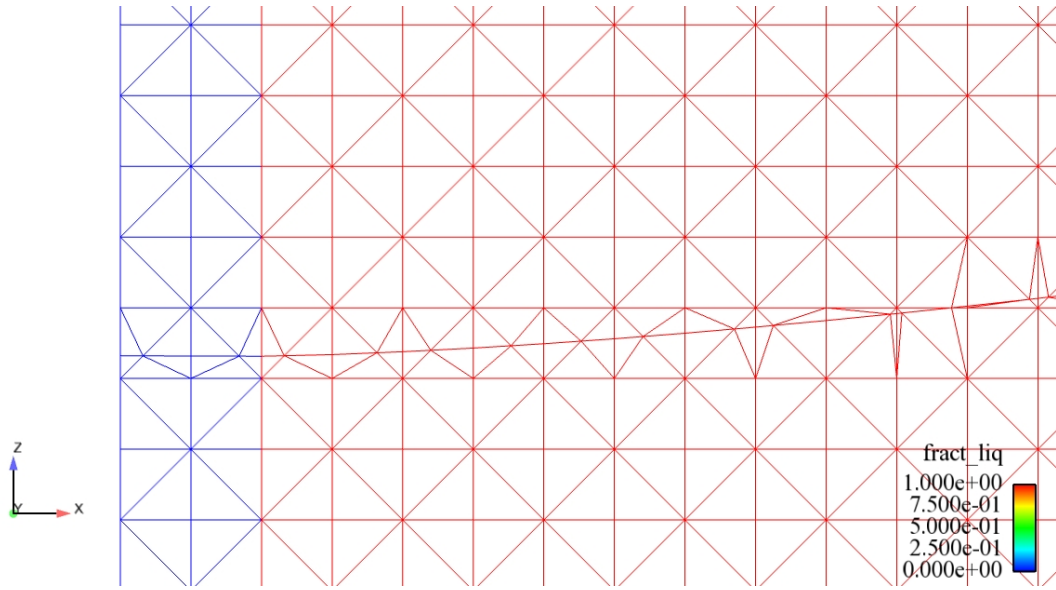


FIGURE 7.36 – Illustration de l'interface pour les modes gravitationnels avec zones solides.

maillage est divisé par deux, le mouvement de l'interface se rapproche du mouvement théorique de celle-ci, ce qui montre la bonne implémentation de notre algorithme transitoire de type eulérien lorsqu'il y a présence de régions solidifiées.

7.2 Influence des talus sur l'interface

La validation de l'algorithme développé au paragraphe 4.6 étant faite, nous pouvons dès lors étudier l'influence des talus sur l'interface aluminium-bain stationnaire. Pour ce faire, nous travaillerons sur une cuve industrielle réaliste complète. Ainsi, le maillage utilisé pour nos calculs contient les isolants thermiques situés autour de la cuve, en particulier ceux entourant les fluides, ainsi que les griffes, les barres cathodiques, etc., comme illustré dans la FIGURE 1.1.

Sur cette géométrie, nous calculons les interfaces stationnaires pour les trois configurations de talus suivantes :

- A1** Le domaine Ω_s est vide. Cette situation est celle utilisée habituellement pour le calcul d'interfaces aluminium-bain stationnaires.
- A2** Ω_s est le domaine solide stationnaire obtenu par l'algorithme présenté à la section 6.3 lorsque le champ de vitesse \vec{u} est supposé nul pour tout temps $t > 0$. En d'autres termes, Ω_s correspond aux régions solidifiées stationnaires du problème thermoélectrique non couplé aux équations de Navier-Stokes.

A3 Ω_s correspond aux talus stationnaires du problème MHDTE obtenus avec la méthode de la section 6.3.

Soit \mathcal{T}_h une triangulation de la cuve d'électrolyse Λ . Nous rappelons que dans l'algorithme du paragraphe 4.6, nous raffinons \mathcal{T}_h en un maillage \mathcal{S}_h^n conforme à la position de l'interface à chaque pas de temps et que les différents problèmes (potentiel, hydrodynamique et transport de l'interface) sont résolus sur le maillage \mathcal{S}_h^n . La triangulation \mathcal{S}_h^n étant différente à chaque pas de temps, nous avons choisi de calculer les talus stationnaires des situations **A2** et **A3** sur le maillage \mathcal{T}_h et d'interpoler ceux-ci sur la triangulation raffinée \mathcal{S}_h^n à chaque pas de temps en utilisant la méthode présentée au paragraphe 4.5.

Pour simplifier, nous supposons que le champ d'induction \vec{B} est connu pour tout t et ne dépend pas du processus de solidification. De plus, nous faisons l'hypothèse que celui-ci correspond à une interface aluminium-bain horizontale. Nous supposons également que \vec{B} est la superposition des champs d'inductions \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} , où \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} sont les champs d'inductions générés par la cuve, les cuves voisines et le caisson ferromagnétique respectivement. L'intensité \mathcal{I} du courant traversant la cuve est de 375 [kA] et l'induction magnétique \vec{B} a été calculée avec la densité de courant \vec{j} correspondante. Nous simulons $T = 500[s]$ d'évolution temporelle du problème MHD avec interface bain-métal libre avec un pas de temps $\Delta t = 1[s]$. La déformation du plan anodique décrite au paragraphe 3.4.1 est effectuée à chaque pas de temps.

Soit a une des configurations **A1**, **A2** ou **A3** et b une configuration distincte de a . Notons encore f_l^a et f_l^b les fractions liquides associées aux situations a et b ainsi que g^a et g^b les fonctions définissant les interface stationnaires Γ^a et Γ^b via la relation $\Gamma = \{(x, y, z) \in \Omega : z = g(x, y), (x, y) \in \Pi\}$. Soit encore V^i et \vec{u}^i le potentiel et le champ de vitesse stationnaire de la situation i , où $i = a$ ou b . Afin de comparer les solutions stationnaires, nous utilisons les estimateurs suivants :

$$\Delta V = \frac{\|V^a - V^b\|_{L^2(\Lambda)}}{\|V^a\|_{L^2(\Lambda)}}, \quad (7.10)$$

pour mesurer les différences sur le potentiel,

$$\Delta \vec{u} = \frac{\|f_l^a f_l^b (\vec{u}^a - \vec{u}^b)\|_{L^2(\Omega)}}{\|f_l^a f_l^b \vec{u}^a\|_{L^2(\Omega)}}, \quad (7.11)$$

pour chiffrer les écarts sur le champ de vitesse, et

$$\Delta \Gamma = \frac{\|f_l^a f_l^b (g^a - g^b)\|_{L^2(\Pi)}}{\|f_l^a f_l^b g^a\|_{L^2(\Pi)}} \quad (7.12)$$

pour comparer les interfaces stationnaires. Nous obtenons alors les résultats présentés dans la TABLE 7.4.

	ΔV (en %)	$\Delta \vec{u}$ (en %)	$\Delta \Gamma$ (en %)
A1 vs. A2	15.6	52.2	4.12
A1 vs. A3	13.3	34.7	4.82
A2 vs. A3	5.5	37.0	2.20

TABLE 7.4 – Influence des talus sur la solution stationnaire du problème MHD avec interface libre.

Nous obtenons de la TABLE 7.4 que la solution stationnaire du problème MHD avec interface libre semble très sensible à la position des talus. En effet, autant le potentiel que le champ de vitesse sont grandement modifiés par les variations du domaine solide Ω_s . Afin de mieux visualiser ces différences, nous avons illustré l'écoulement des fluides au moyen des lignes de courant. Ces illustrations se trouvent dans les FIGURES 7.38, 7.40 et 7.42, avec lesquelles nous constatons que les champs de vitesse stationnaires sont grandement modifiés par les variations de la géométrie des talus. Deux effets peuvent expliquer ces grandes variations. Le premier provient de la pénalisation de Carman-Kozeny. En effet, ce terme impose des conditions d'adhérence sur le bord des talus alors que nous avons des conditions de glissement sur les bords latéraux du domaine Ω lorsque les talus sont négligés. Le deuxième effet est lié au processus de solidification. En effet, les talus étant des isolants électriques, la répartition du courant dans la cuve est modifiée dès que le profil des talus l'est. Cette adaptation du courant aux zones solides modifie les forces de Lorentz agissant sur les fluides, et donc l'écoulement de ceux-ci. Ces deux phénomènes expliquent en grande partie les différences constatées sur les écoulements stationnaires.

Néanmoins, l'interface bain-métal semble moins sensible à la forme des talus, car les écarts relatifs sur la position de l'interface sont de l'ordre de 2 à 5 %. Cette faible différence provient de l'estimateur utilisé pour calculer l'écart relatif entre les frontières bain-métal. En effet, les fonctions g utilisées lors du calcul de $\Delta \Gamma$ mesurent la déformation de l'interface depuis le fond de la cuve et non pas depuis la position d'équilibre de l'interface. Comme l'écart moyen entre la déformation de l'interface et sa position d'équilibre est de l'ordre de 1 à 2 [cm] et que la position d'équilibre de l'interface le plan horizontal situé 20 [cm] en dessus du fond de la cuve, toutes les interfaces présentées ici sont quasiment planes si on les compare depuis le fond de la cuve. Cela explique le peu de différences constatées entre les interfaces stationnaires des situations **A1**, **A2** et **A3**. Afin d'avoir une meilleure visualisation des dissemblances entre ces trois frontières, nous avons illustré l'écart entre la déformation de l'interface et sa position d'équilibre dans les FIGURES 7.37, 7.39 et 7.41. Des lignes de niveau ont été ajoutées sur ces illustrations afin d'avoir une meilleure visualisation. Nous constatons alors que l'écart entre la déformation de l'interface et sa position d'équilibre est très sensible à la forme des talus.

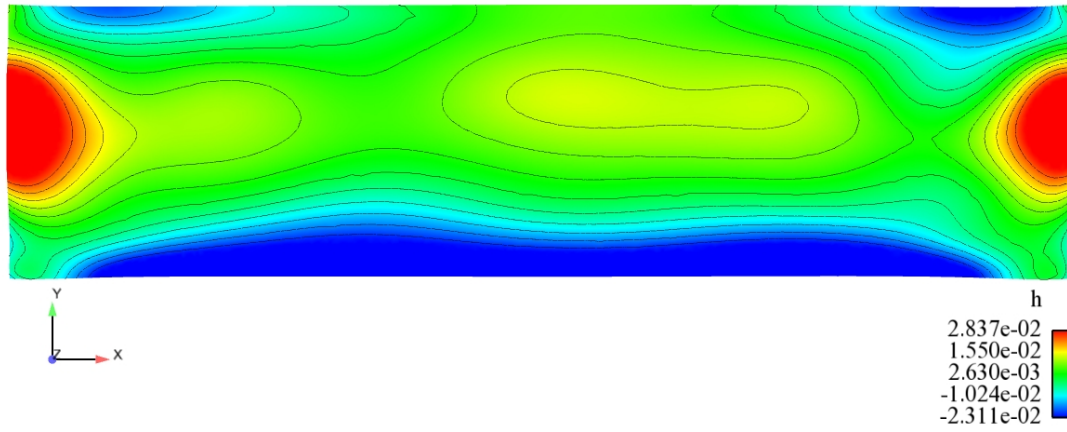


FIGURE 7.37 – Interface aluminium-bain stationnaire dans la configuration **A1**.

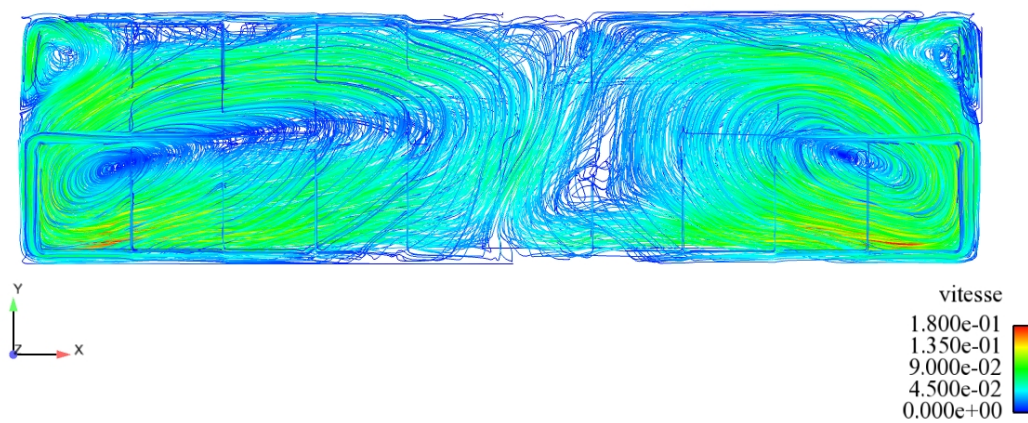


FIGURE 7.38 – Ecoulement stationnaire dans la configuration **A1**.

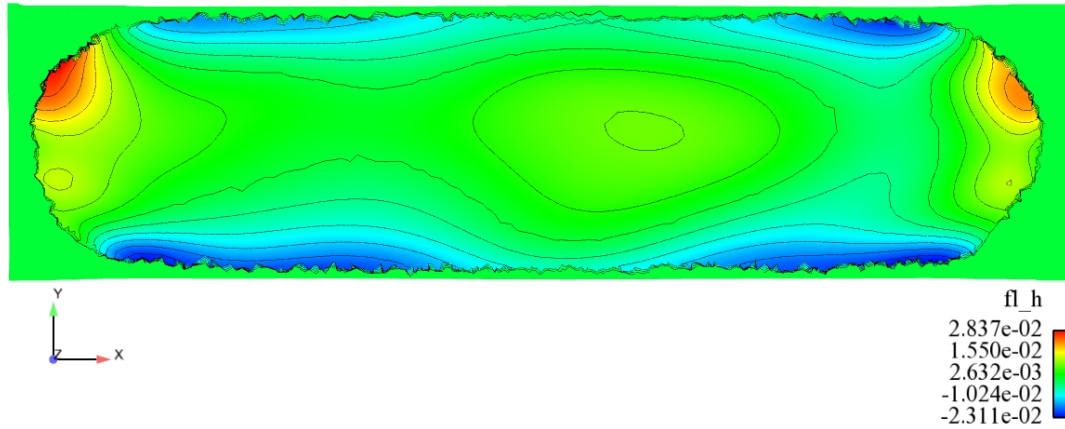


FIGURE 7.39 – Interface aluminium-bain stationnaire dans la configuration **A2**. La déformation de l'interface a été multipliée par la fraction liquide afin de visualiser uniquement la déformée de l'interface dans le domaine liquide.

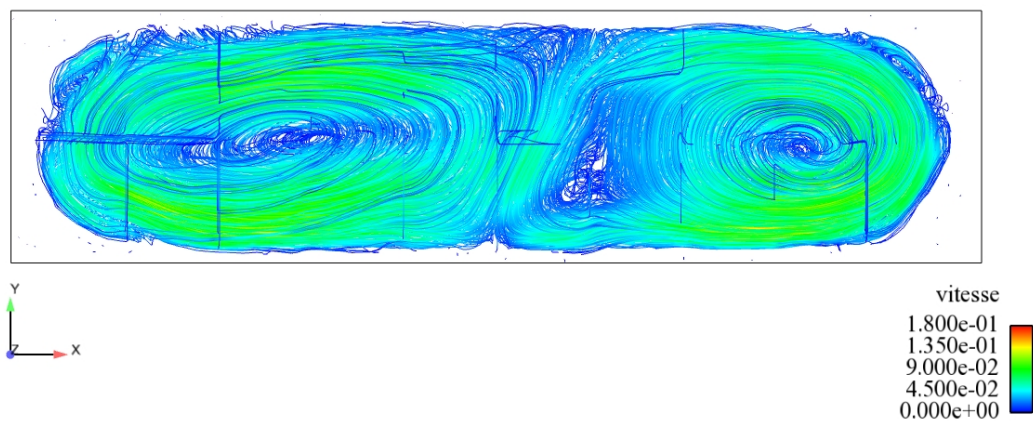


FIGURE 7.40 – Ecoulement stationnaire dans la configuration **A2**.

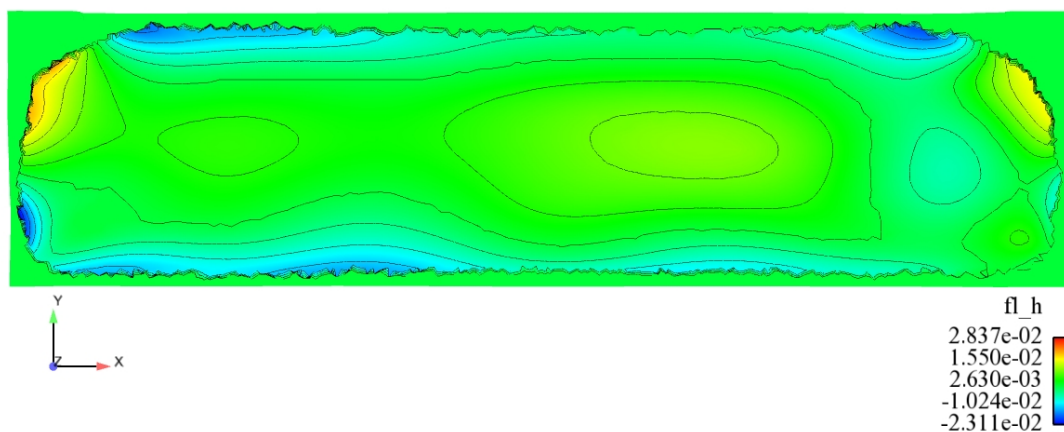


FIGURE 7.41 – Interface aluminium-bain stationnaire dans la configuration **A3**. La déformation de l'interface a été multipliée par la fraction liquide afin de visualiser uniquement la déformée de l'interface dans le domaine liquide.

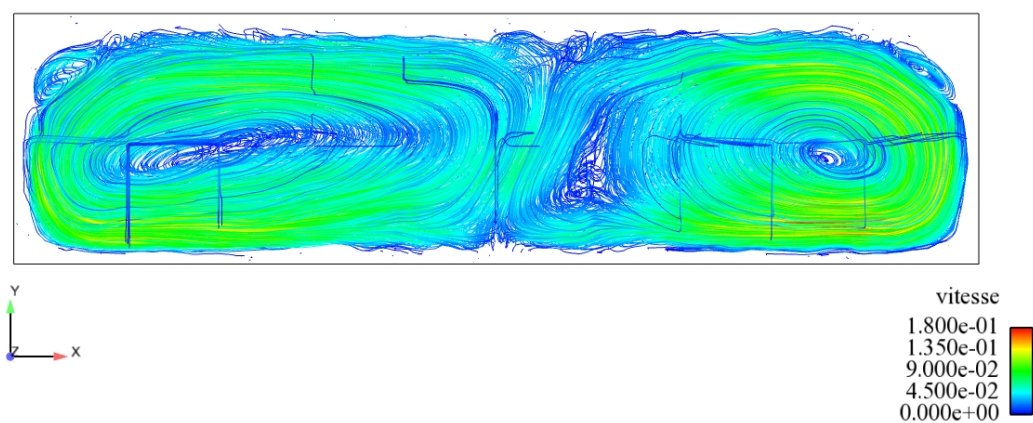


FIGURE 7.42 – Ecoulement stationnaire dans la configuration **A3**.

7.3 Influence de l'interface sur les talus

Nous étudions maintenant l'influence de l'interface aluminium-bain sur les talus stationnaires. Cette étude est effectuée sur une cuve industrielle simplifiée, identique à celle utilisée pour mesurer l'influence des zones solides sur l'interface aluminium-bain stationnaire. Nous rappelons également que dans nos calculs de talus stationnaires, l'interface aluminium-bain Γ est supposée statique afin de simplifier la résolution numérique.

Afin de chiffrer l'influence de l'interface sur les talus stationnaires, nous calculons ces derniers pour les interfaces suivantes :

- B1** L'interface aluminium-bain Γ est horizontale. Cette situation est celle utilisée actuellement dans le logiciel ALUCCELL pour calculer le domaine Ω_s stationnaire.
- B2** L'interface aluminium-bain Γ est la frontière aluminium-bain stationnaire obtenue par l'algorithme du paragraphe 4.6 lorsque le domaine Ω_s est vide.
- B3** Γ est l'interface aluminium-électrolyte stationnaire obtenue par la méthode du paragraphe 4.6 lorsque le domaine Ω_s correspond aux talus stationnaires obtenus dans la configuration **B1**.

Les talus stationnaires sont alors calculés avec l'algorithme de la section 6.3 sur des triangulations \mathcal{S}_h de la cuve d'électrolyse conformes à chacune des situations **B1**, **B2** et **B3**. Comme pour l'étude de l'influence des talus sur l'interface aluminium-bain stationnaire, nous supposons que le champ d'induction \vec{B} est connu pour tout t et ne dépend pas du processus de solidification. Nous faisons également l'hypothèse que ce dernier est la superposition des champs d'induction \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} générés respectivement par la cuve, les cuves voisines et le caisson ferromagnétique. De plus, l'interface aluminium-bain est prise plane pour le calcul de \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} . L'intensité \mathcal{I} du courant traversant la cuve est de 375'000 [A] et le champ d'induction \vec{B} a été calculé avec la densité de courant \vec{j} correspondante.

Le pas de temps Δt utilisé dans nos simulations vaut $\Delta t = 2500[s]$. Nous n'effectuons pas un nombre fixe de pas de temps, les simulations s'arrêtent automatiquement si la différence relative entre la puissance électrique et le flux est plus petite que 0.5% et si la discrétance du flux, ainsi que la discrétance de la puissance, est plus petite que 0.1%.

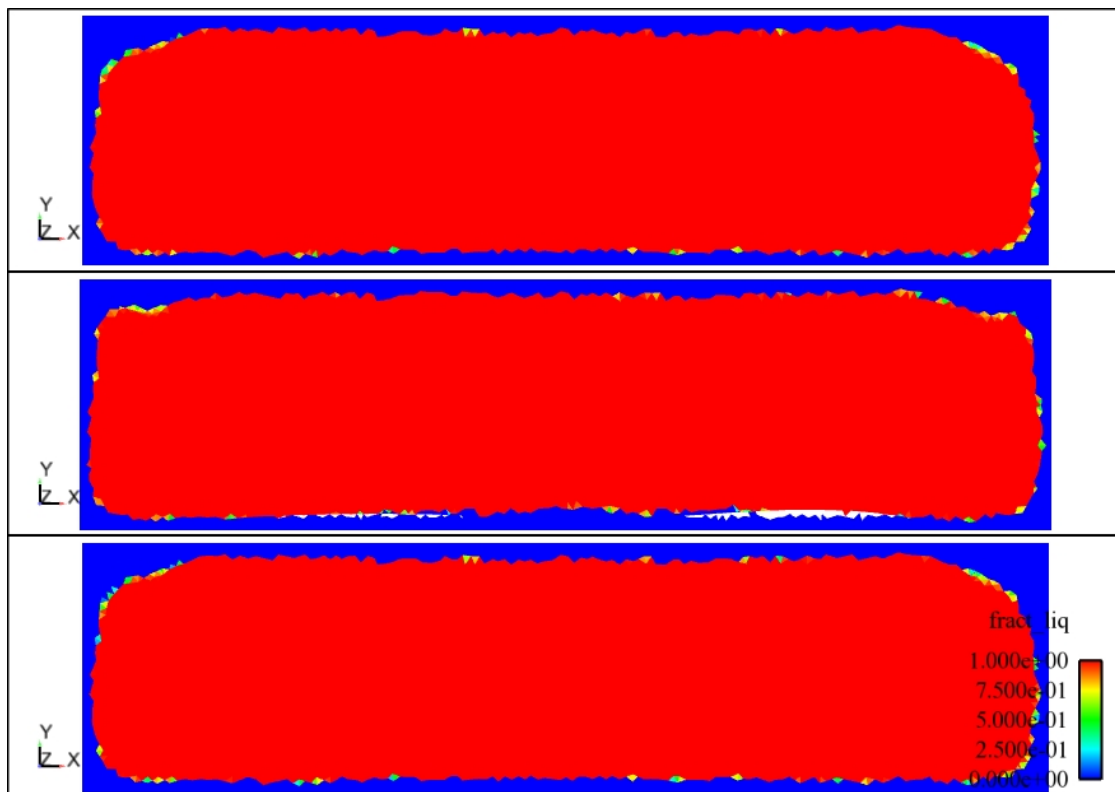


FIGURE 7.43 – Talus stationnaires pour les situations **B1**, **B2** et **B3**, coupe au niveau du plan $z = 20[cm]$.

La FIGURE 7.43 représente une coupe du domaine Ω par rapport au plan $z = 0.2[m]$. L'image du haut correspond à la situation **B1**, celle du milieu à **B2** et celle du bas à **B3**. Nous constatons que les zones solides, représentées en bleu, sont très semblables pour les trois configurations. Il semble donc que les talus soient peu sensibles à la position de l'interface aluminium-bain. Afin de mesurer les différences entre ces trois cas, nous utilisons les estimateurs suivants :

ΔV	Ecart relatif en norme L^2 sur le potentiel
ΔT	Ecart relatif en norme L^2 sur la température
ΔH	Ecart relatif en norme L^2 sur l'enthalpie
$\Delta \vec{u}$	Ecart relatif en norme L^2 sur la vitesse (calculé sur l'intersection des domaines liquides)
Δf_l	Ecart relatif en norme L^1 sur la fraction liquide

TABLE 7.5 – Estimateurs utilisés pour la comparaison des solutions stationnaires.

	B1 vs. B2	B1 vs. B3	B2 vs. B3
ΔV (en %)	5.37	2.57	4.29
$\Delta \vec{u}$ (en %)	20.5	8.84	18.7
ΔT (en %)	2.16	1.31	2.16
ΔH (en %)	2.16	1.31	2.16
Δf_l (en %)	3.52	2.83	2.98

TABLE 7.6 – Comparaison des champs stationnaires obtenus dans les situations **B1**, **B2** et **B3**.

En observant la TABLE 7.6, nous constatons que les solutions stationnaires obtenues dans les trois configurations sont très semblables. En effet, hormis sur le champ de vitesse, l'écart entre les solutions stationnaires est inférieur à 6%. Notons également que le volume du domaine Ω_{liq} est peu influencé par la position de l'interface. La comparaison la plus intéressante est celle des situations **B1** et **B3**. En effet, que l'on prenne une interface plate ou l'interface aluminium-bain stationnaire obtenue avec les talus donnés par la situation **B1**, la solution stationnaire du problème MHDTE est quasiment identique. Cela montre que le choix de calculer des talus stationnaires avec une interface aluminium-bain horizontale est pertinent, car la présence des talus limite la déformation de l'interface (voir la section 7.2).

7.4 Raffinement du maillage au voisinage du front de solidification

Nous présentons maintenant la validation de la méthode de raffinement de maillage au voisinage du front de solidification développée au paragraphe 6.4. Dans un premier temps, nous calculons des talus stationnaires avec ce nouvel algorithme sur une cuve d'électrolyse

simplifiée. Les résultats obtenus sont ensuite comparés avec ceux donnés par la méthode du paragraphe 6.3. Ensuite, nous faisons la même comparaison sur une cuve industrielle simplifiée. Cette analyse montre que les solutions stationnaires obtenues sont voisines, bien qu'il y ait quelques différences sur la formes des talus stationnaires.

7.4.1 Cuve numérique thermique

Nous débutons notre validation de l'algorithme du paragraphe 6.4 sur la cuve numérique. Cette géométrie a déjà été utilisée pour la validation de l'algorithme transitoire de type eulérien développé au chapitre 4. Néanmoins, cette géométrie ne tenait pas compte des isolants entourant les fluides, ce qui ne permettait pas le calcul de solutions stationnaires du problème MHDTE. Afin de remédier à ce défaut, nous avons ajouté des isolants à la cuve numérique. Nous pouvons dès lors calculer des solutions stationnaires du problème MHDTE sur cette géométrie. Afin d'éviter toute confusion avec la cuve numérique de la section 7.1.3, cette nouvelle géométrie est appelée *cuve numérique thermique*. Des illustrations de cette dernière se trouvent dans les FIGURES 7.44 et 7.45.

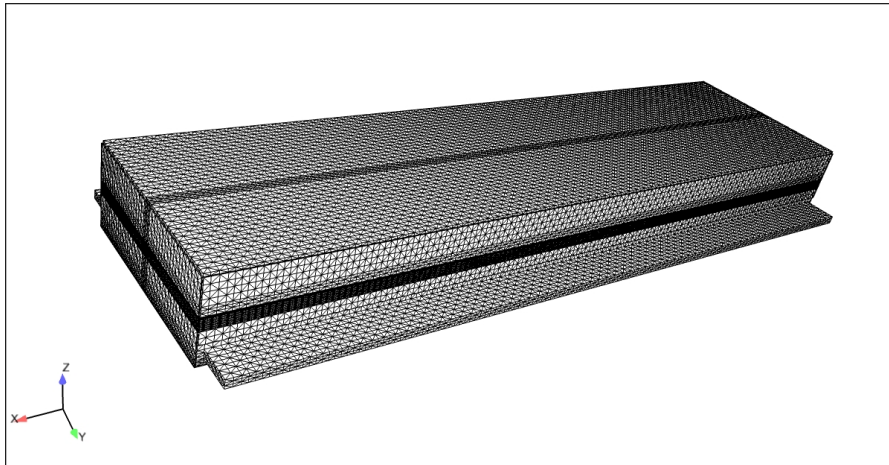


FIGURE 7.44 – Cuve numérique thermique, vue extérieure.

Nous utilisons un pas de temps $\Delta t = 2500 [s]$ et nous faisons 200 itérations de l'algorithme de la section 6.3 ou de celui de la section 6.4.2. Ce choix est justifié par le constat suivant : avec le critère d'arrêt basé sur la discrédance du flux, sur la discrédance de la puissance et sur la différence entre le flux et la puissance, une solution stationnaire du problème MHDTE est obtenue après 150 pas de temps pour les paramètres mentionnés précédemment. Ainsi, si nous effectuons 200 itérations pour les algorithmes des sections 6.3 et 6.4.2, nous aurons convergé vers une solution stationnaire.

Pour des raisons de simplifications, l'interface aluminium-bain est prise plane et constante au cours du temps. Afin de simplifier la résolution du problème MHDTE, le champ d'induction

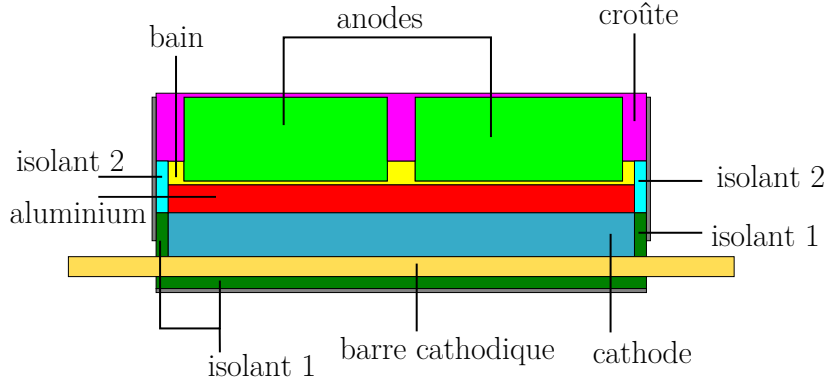


FIGURE 7.45 – Composants de la cuve numérique thermique, intersection avec le plan $x = 0$.

\vec{B} est supposé connu pour tout t et correspondant à une interface aluminium-bain horizontale. Nous faisons également l'hypothèse que le champ d'induction \vec{B} ne dépend pas du processus de solidification. L'approximation \vec{B}_h du champ d'induction \vec{B} utilisée dans nos simulations est la superposition des champs d'induction \vec{B}_{int} , \vec{B}_{ext} et \vec{B}_{ferro} générés par la cuve, les cuves voisines et le caisson ferromagnétique respectivement. L'intensité \mathcal{I} du courant traversant la cuve est de 360'000 [A] et \vec{B}_h a été calculé avec la densité de courant correspondante.

Afin de vérifier si la méthode de raffinement du maillage est implémentée de manière correcte, nous effectuons le calcul des solutions stationnaires du problème MHDTE dans les configurations suivantes :

- C1** Le champ de vitesse \vec{u} est pris constant et égal à $\vec{0}$ pour tout $t > 0$. Dans cette situation, nous modifions la valeur des conductivités thermiques de l'aluminium et du bain en prenant une conductivité thermique équivalente à celle obtenue lorsque le champ de vitesse \vec{u} est couplé à la solidification.
- C2** Le champ de vitesse \vec{u} est couplé aux problèmes thermique et électromagnétique.

Une fois les simulations terminées, les solutions stationnaires obtenues sont comparées à l'aide des estimateurs définis dans la TABLE 7.7.

ΔV	Ecart relatif en norme L^2 sur le potentiel
ΔT	Ecart relatif en norme L^2 sur la température
ΔH	Ecart relatif en norme L^2 sur l'enthalpie
$\Delta \vec{u}$	Ecart relatif en norme L^2 sur la vitesse (calculé sur l'intersection des domaines liquides)
Δf_l	Ecart relatif en norme L^1 sur la fraction liquide

TABLE 7.7 – Estimateurs utilisés pour la comparaison des solutions stationnaires obtenues avec raffinement et sans raffinement de la triangulation.

7.4. Raffinement du maillage au voisinage du front de solidification

Nous obtenons alors les résultats présentés dans la TABLE 7.8. De manière générale, nous constatons que les solutions stationnaires données par les algorithmes des sections 6.3 et 6.4.2 sont très proches. En effet, les écarts relatifs sur l'enthalpie, la température ou le volume de talus stationnaire sont inférieurs à 4%. Néanmoins, l'écart relatif en norme L^2 sur le champ de vitesse stationnaire est plus important. Cela est vraisemblablement dû aux légères variations de la position du talus combinée avec le modèle de viscosité turbulente. Les résultats obtenus montrent que la méthode de raffinement du maillage au voisinage du front de solidification est implémentée de manière correcte.

Configuration	ΔV	ΔT	ΔH	Δf_l	$\Delta \vec{u}$
C1	1.16 %	0.36 %	0.36 %	0.72 %	–
C2	3.73 %	1.91 %	1.91 %	2.89 %	15.1 %

TABLE 7.8 – Ecart relatif entre les solutions stationnaires obtenues avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification.

Si nous étudions maintenant la forme des talus stationnaires, nous constatons que ceux-ci sont très semblables, comme illustré dans les FIGURES 7.46 et 7.47 où sont représentés le profil des talus au niveau des plans $z = 0.2[m]$ et $z = 0.0[m]$. Dans ces deux figures, les zones solides sont colorées en bleu et le domaine liquide en rouge. A chaque fois, l'image du haut représente les résultats obtenus avec la méthode du paragraphe 6.4.2 et l'image du bas les résultats trouvés par l'algorithme de la section 6.3. En observant ces figures, nous constatons qu'il y a des différences sur la forme des talus de l'ordre d'une couche de maille sur les bords latéraux du domaine et au niveau des coins de la cuve. Ces modifications de l'épaisseur du talus sur une couche de maille changent peu le profil des talus stationnaires. Les différences les plus marquées se trouvent dans les coins de la cuve, comme illustré dans la FIGURE 7.48 à l'aide d'une visualisation en trois dimensions. Comme précédemment, l'image supérieure représente les talus obtenus avec raffinement de la triangulation et l'image inférieure ceux obtenus sans raffinement. En observant la FIGURE 7.48 Nous constatons que les formes des talus stationnaires sont très semblables et que les talus obtenus avec raffinement de la triangulation sont un peu plus lisses.

La FIGURE 7.49 représente les lignes de courant des écoulements stationnaires trouvés par les méthodes des paragraphes 6.3 et 6.4.2. L'image supérieure représente les lignes de courant obtenues avec le raffinement de la triangulation au voisinage du front de solidification et l'image inférieure celles trouvées par l'algorithme de la section 6.3. Nous constatons que les écoulements stationnaires trouvés par les deux approches sont similaires autant dans la structure générale que dans l'intensité du champ de vitesse stationnaire. Néanmoins, il y a des variations sur l'écoulement, notamment dans les coins avals de la cuve, ainsi qu'à l'endroit où les deux tourbillons principaux se rejoignent. Cela explique en grande partie le 15 % de différence observé sur les champs de vitesse stationnaires obtenus par les deux approches.



FIGURE 7.46 – Talus stationnaires au niveau du plan $z = 0.2[m]$ pour les approches avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification pour la configuration **C2**.

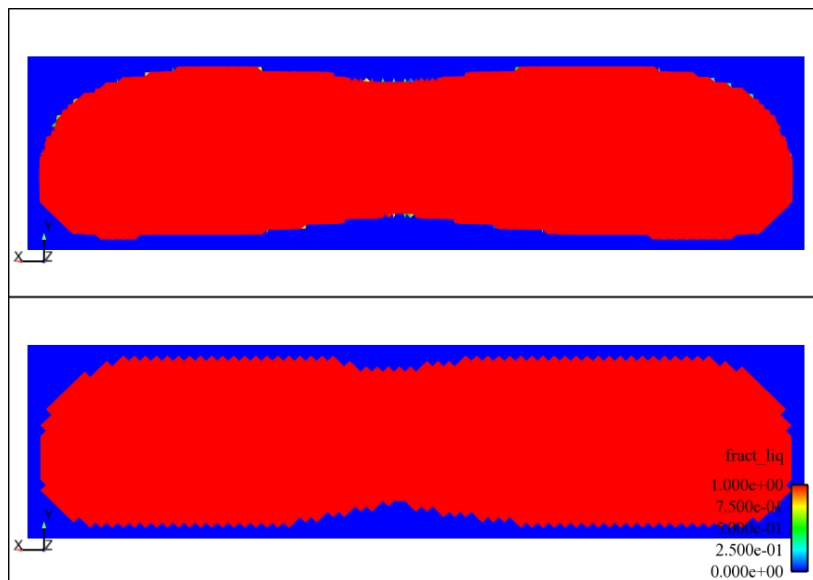


FIGURE 7.47 – Talus stationnaires au niveau du plan $z = 0[m]$ pour les approches avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification pour la configuration **C2**.

7.4. Raffinement du maillage au voisinage du front de solidification

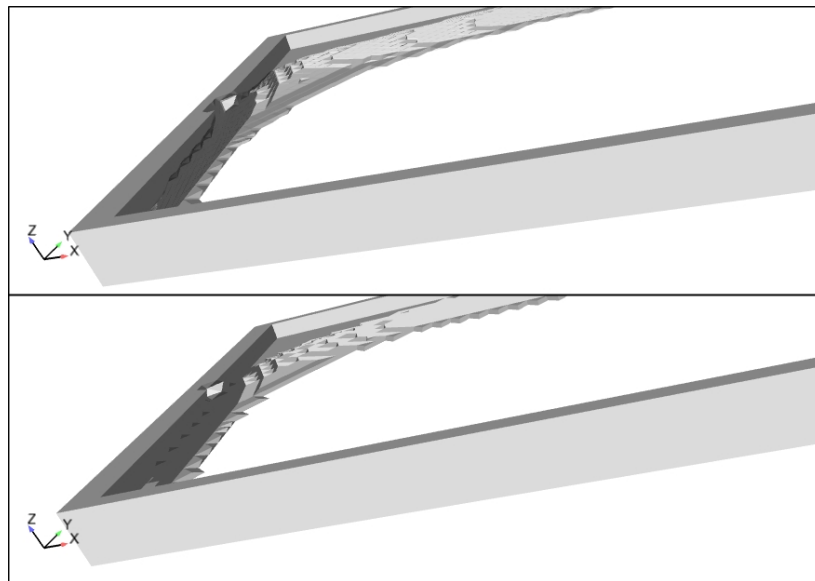


FIGURE 7.48 – Visualisation en trois dimension des talus stationnaires pour les approches avec raffinement et sans raffinement de la triangulation pour la configuration **C2**.

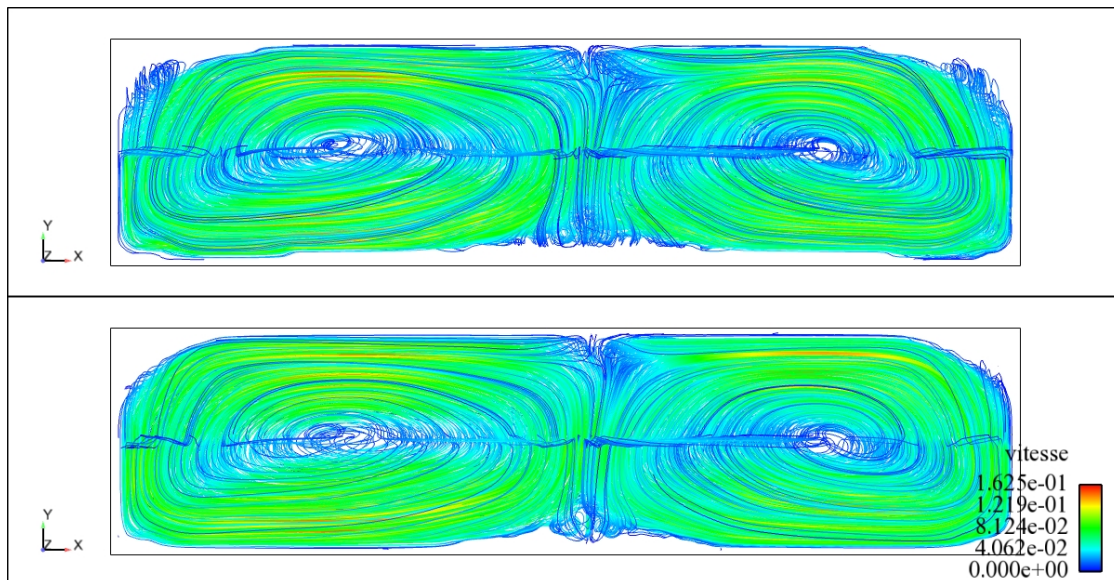


FIGURE 7.49 – Ecoulements stationnaires des fluides pour les approches avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification pour la configuration **C2**.

7.4.2 Cuve industrielle simplifiée

Nous comparons maintenant les solutions stationnaires du problème MHDTE obtenues sur une cuve industrielle simplifiée avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification. Pour ce faire, nous utilisons les algorithmes des sections 6.3 et 6.4 pour calculer les solutions stationnaires, puis nous comparons les résultats obtenus sur les configurations suivantes :

D1 Le champ de vitesse \vec{u} est pris constant et égal à $\vec{0}$ pour tout $t > 0$. Comme pour la cuve numérique thermique, nous modifions la valeur des conductivités thermiques de l'aluminium et du bain en prenant une conductivité thermique équivalente à celle obtenue lorsque le champ de vitesse \vec{u} est couplé à la solidification.

D2 Le champ de vitesse \vec{u} est couplé aux problèmes thermique et électromagnétique.

Les calculs sont effectués sur la même cuve que celle utilisée à la section 7.3. En conséquence, les paramètres numériques utilisés pour nos simulations sont ceux du paragraphe 7.3, tout comme le champ d'induction \vec{B} et l'intensité \mathcal{I} du courant traversant la cuve. A la différence de la section 7.3, les simulations effectuées ici s'arrêtent après un nombre fixe de pas de temps, fixé à 300. Ce choix est justifié de la manière suivante : avec le critère d'arrêt basé sur la discrédance du flux, sur la discrédance de la puissance et sur la différence entre le flux et la puissance, une solution stationnaire du problème MHDTE est obtenue après 230 pas de temps avec les paramètres de la section 7.3. Ainsi, si nous effectuons 300 itérations pour les algorithmes des sections 6.3 et 6.4.2, nous aurons convergé vers une solution stationnaire. L'interface entre les fluides est prise plane, car nous avons vu que la position de l'interface aluminium-bain ne change que légèrement les talus stationnaires. En reprenant les estimateurs définis à la TABLE 7.7, l'écart entre les solutions stationnaires trouvées avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification est présenté dans la TABLE 7.9.

Configuration	ΔV	ΔT	ΔH	Δf_l	$\Delta \vec{u}$
D1	1.93 %	1.45 %	1.45 %	1.59 %	–
D2	2.36 %	2.61 %	2.61 %	2.88 %	13.4 %

TABLE 7.9 – Ecart relatif entre les solution stationnaires obtenues avec raffinement et sans raffinement de la triangulation au voisinage du front de solidification.

Nous constatons que les solutions stationnaires obtenues par les deux approches sont très semblables. Autant l'écart relatif sur le potentiel que l'écart relatif sur la température ou l'écart relatif sur l'enthalpie stationnaire est plus faible que 5% et ce pour les configurations **D1** et **D2**. Concernant l'écart relatif en norme L^2 sur le champ de vitesse, celui-ci est de l'ordre de 10%, mais cela est principalement dû au fait que le domaine liquide n'est pas tout à fait similaire, comme le montre les FIGURES 7.50, 7.51 et 7.52. Dans chacune de ces figures, l'image supérieure correspond aux talus stationnaires donnés par l'algorithme de la section 6.4.2 et l'image inférieure aux zones solides stationnaires trouvées par l'algorithme du paragraphe 6.3. Dans les FIGURES 7.50 et 7.51, le domaine liquide est représenté en rouge et le domaine solide en bleu. Nous observons que la forme des talus stationnaires obtenue par les deux approches est semblable, mais qu'il y a néanmoins quelques différences dans les coins avals de la cuve. Ceci est particulièrement bien illustré dans la FIGURE 7.52. Cette différence sur les talus stationnaires modifie l'écoulement des fluides, comme le montre la FIGURE 7.53 qui présente les lignes de courant stationnaires obtenues par les deux algorithmes. Comme précédemment l'image supérieure est relative à la méthode de la section 6.4 et l'image inférieure à celle du paragraphe 6.3.

En conclusions, les deux approches utilisées pour trouver les talus stationnaires donnent des résultats similaires, mais il y a des différences locales, en particulier dans les coins avals de la cuve, où il y a moins de talus. Nous constatons également que les résultats obtenus ici sont réalistes, malgré le fait que les paramètres numériques utilisés surestiment la proportion de talus. Du fait que les calculs ont été effectués sur une cuve industrielle simplifiée, nous n'avons pas eu la possibilité de comparer les résultats obtenus avec des mesures, ce qui nous aurait permis d'améliorer nos résultats numériques.

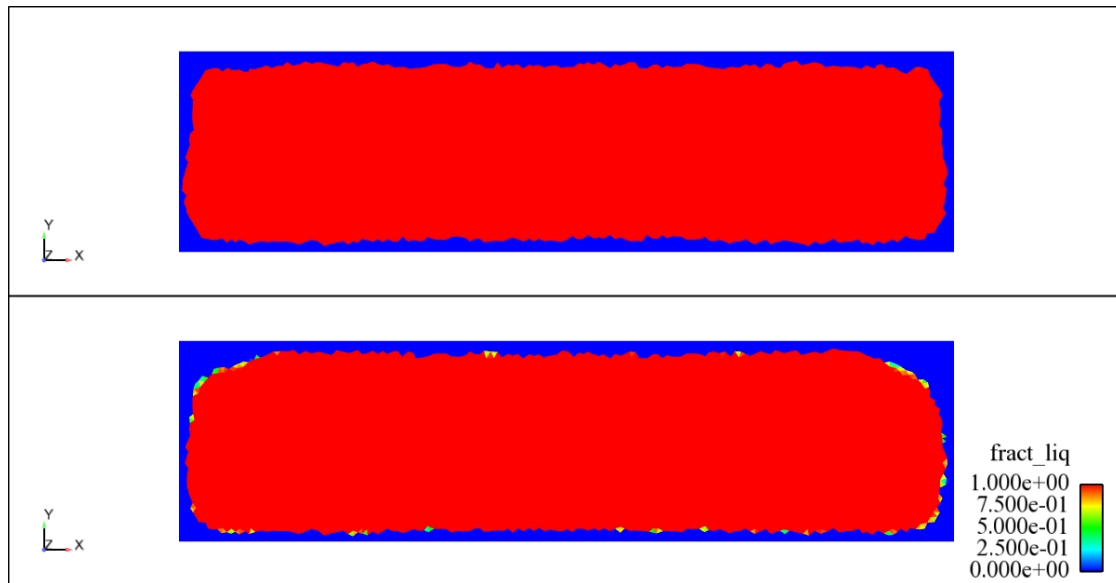


FIGURE 7.50 – Talus stationnaires au niveau du plan $z = 0.2[m]$ pour les approches avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification pour la configuration **D2**.

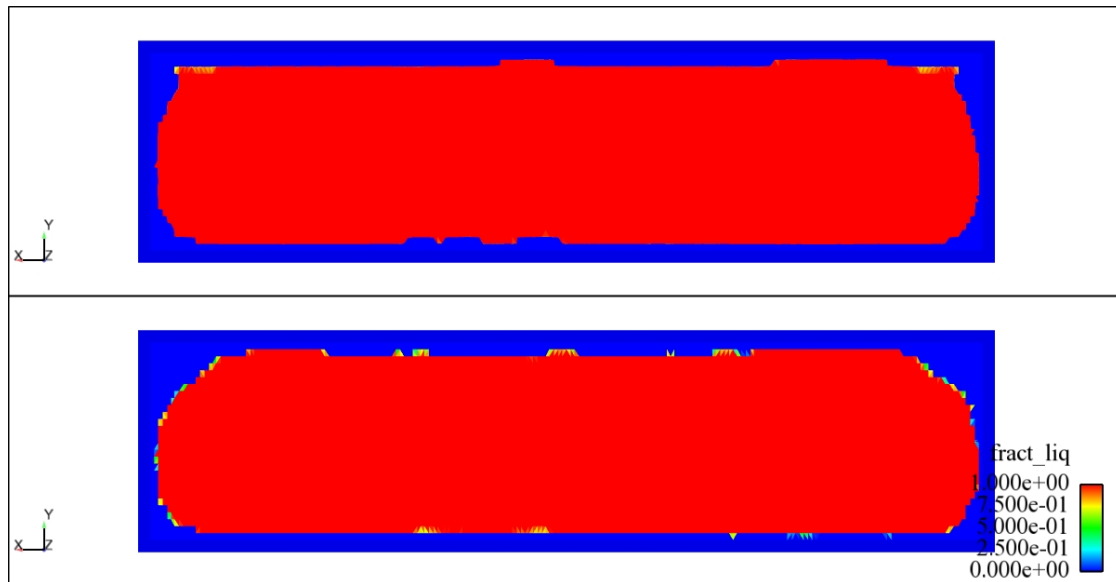


FIGURE 7.51 – Talus stationnaires au niveau du plan $z = 0[m]$ pour les approches avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification pour la configuration **D2**.

7.4. Raffinement du maillage au voisinage du front de solidification

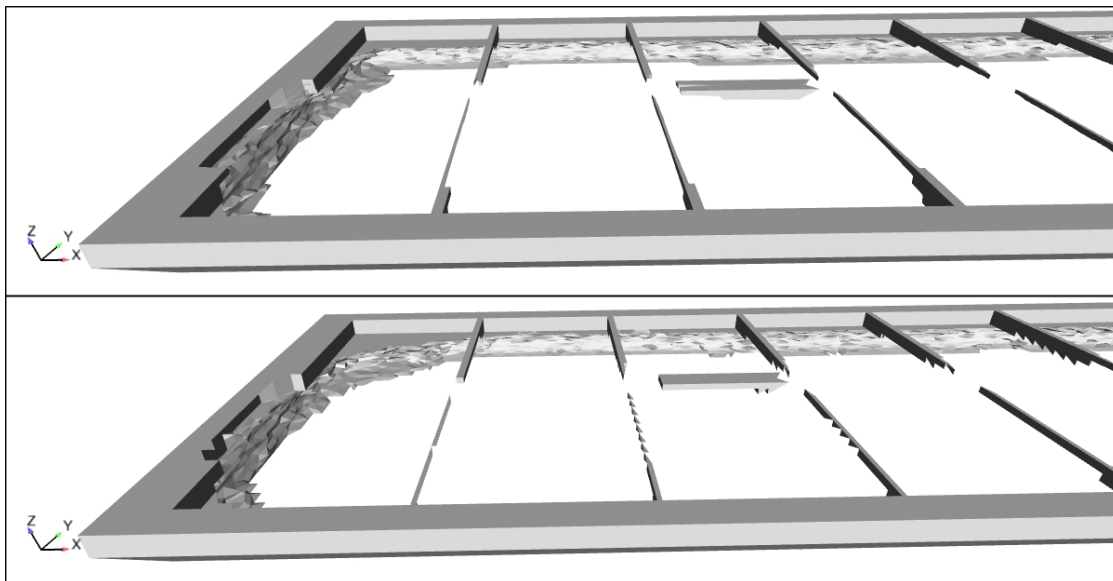


FIGURE 7.52 – Visualisation en trois dimension des talus stationnaires pour les approches avec raffinement et sans raffinement de la triangulation pour la configuration **D2**.

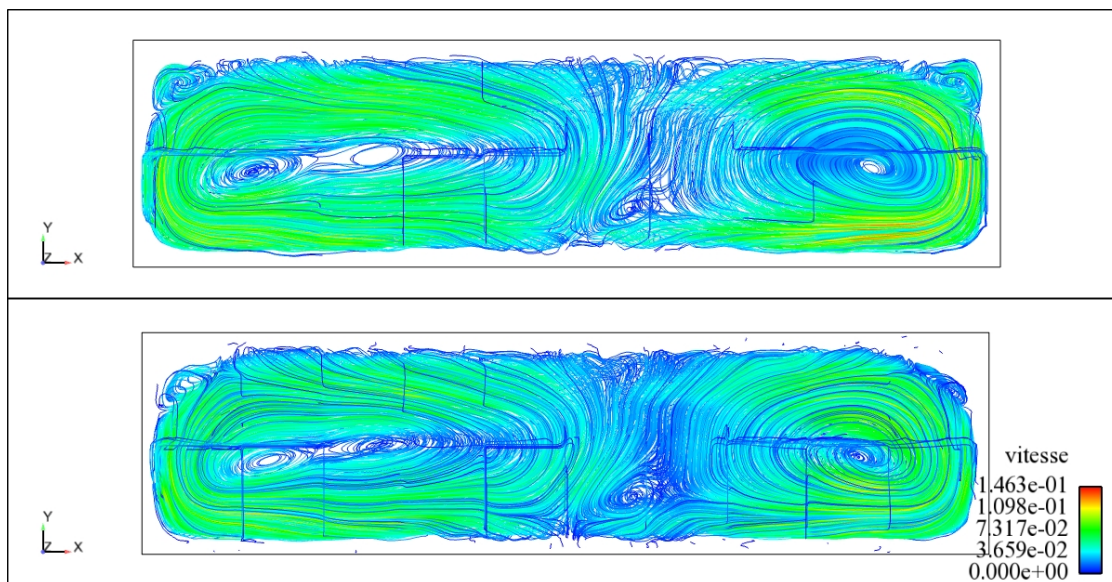


FIGURE 7.53 – Ecoulements stationnaires des fluides pour les approches avec raffinement et sans raffinement du maillage au voisinage du front de solidification pour la configuration **D2**.

7.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons montré que l'algorithme transitoire de type eulérien développé à la section 4.6 est correctement implémenté et permet de retrouver les résultats obtenus par l'algorithme transitoire de type lagrangien utilisé jusqu'à maintenant dans ALU-CELL (voir [51]). De plus, pour l'expérience de Coventry, les résultats trouvés par la méthode développée dans ce document sont plus proches des résultats expérimentaux que ceux donnés par l'approche lagrangienne. En effet, nous avons constaté que la pente de la régression linéaire associée au RMS obtenue par notre algorithme développé à la section 4.6 est plus proche de la pente de la régression linéaire du RMS associée aux mesures expérimentales que celle obtenue avec l'algorithme transitoire de type lagrangien développé dans [51]. Cela montre que l'approche développée dans ce travail permet de mieux reproduire le comportement des instabilités MHD observées dans l'expérience de Coventry.

Nous avons étudié l'influence de l'interface aluminium-bain sur les talus stationnaires. Il en ressort que celle-ci a peu d'influence sur la forme des talus stationnaires. En effet, les écarts entre les solutions stationnaires du problème MHDTE obtenues avec les trois interfaces sont inférieurs à 5%. En conséquence, nous recommandons l'usage d'une interface aluminium-bain plane pour la recherche de solutions stationnaires du problème MHDTE. L'influence des talus sur l'interface stationnaire a également été étudiée. Les résultats obtenus montrent que le potentiel et le champ de vitesse sont grandement influencés par la géométrie des talus. De plus, l'interface aluminium-bain semble également sensible à la forme des talus utilisés pour le calculs des frontières bain-métal stationnaires.

L'algorithme de raffinement de maillage développé au chapitre 3 a été appliqué au problème de solidification. Les résultats numériques montrent que la subdivision des tétraèdres apporte peu de changements globaux sur la forme des talus stationnaires. Néanmoins, des variations locales du profil des talus ont été constatées, en particulier dans les coins avals de la cuve. Nous avons également introduit une cuve d'électrolyse simplifiée avec isolants thermiques, appelée cuve numérique thermique. Celle-ci permet de reproduire le comportement thermoélectrique d'une cuve réelle et de tester les différentes méthodes utilisées lors de la résolution numérique du problème MHDTE.

Chapitre 8

Conclusions

Cette thèse avait pour objectif de mettre en œuvre des algorithmes qui permettent de simuler numériquement le processus de Hall-Héroult en tenant compte à la fois du processus de solidification et du mouvement de l'interface aluminium-bain. Afin d'effectuer cela, nous avons créé un algorithme transitoire de type eulérien basé sur un raffinement local de la triangulation au voisinage de l'interface aluminium-bain. Nous avons étendu ce raffinement du maillage à la cuve entière afin de garantir la conformité géométrique du maillage lorsque des isolants thermiques sont présents autour des fluides.

L'algorithme transitoire de type eulérien développé dans cette thèse a été validé sur différentes situations, en comparant les résultats obtenus à ceux donnés par l'approche lagrangienne utilisée actuellement dans le logiciel *ALUCCELL*. Autant les solutions stationnaires que l'évolution temporelle du modèle MHD avec interface libre obtenues par notre méthode sont très semblables aux résultats trouvés par l'algorithme transitoire de type lagrangien utilisé jusqu'à présent dans *ALUCCELL*. Ainsi, si le domaine solide Ω_s est vide, il n'y a pas de différences significatives entre les approches eulérienne et lagrangienne. Néanmoins, le temps CPU pris par notre algorithme transitoire de type eulérien pour effectuer une itération de l'algorithme 4.6 est environ 1.2 fois plus grand que celui pris par l'approche lagrangienne pour faire la même itération. Bien que notre méthode soit un peu plus lente que celle utilisée actuellement, nous recommandons l'usage de l'algorithme transitoire de type eulérien, car ce dernier permet à l'interface aluminium-bain de toucher les anodes, ainsi que des ruptures topologiques de la nappe de métal.

En plus de nombreuses améliorations apportées aux calculs des talus stationnaires, nous avons créé un schéma numérique permettant de conserver l'énergie. L'apport de cette méthode dans la résolution numérique du problème MHDTE est important. Sans l'utilisation de ce nouveau schéma, comme le champ de vitesse approché n'est pas exactement à divergence nulle, des pertes d'énergies sont constatées avec un schéma numérique standard. Ces pertes conduisent alors à une surestimation des zones solides stationnaires. L'utilisation du schéma conservatif développé dans le chapitre 5 de ce document permet d'éviter cette surestimation.

L'influence des talus sur l'interface aluminium-bain stationnaire a également été étudiée. En calculant les zones solides stationnaires pour différentes frontières aluminium-électrolyte, nous avons montré que le profil des talus stationnaires n'est que très légèrement modifié par la position de l'interface bain-métal. En effet, que l'on utilise une interface aluminium-bain plane ou bien calculée sans talus, la forme du domaine solide stationnaire est très proche. Ainsi, nous encourageons l'utilisation d'une interface aluminium-bain horizontale pour le calcul des talus stationnaires.

Une étude de sensibilité de l'interface bain-métal stationnaire au profil des talus a également été effectuée. Cela a été fait en calculant des frontières aluminium-bain stationnaires pour différents profils de talus. Les résultats obtenus montrent que l'écoulement des fluides est très sensible à la géométrie des zones solides, tout comme le potentiel. Nous avons également montré que l'interface bain-métal stationnaire est influencée par la forme des zones solides, bien que les différences sur la déformation de l'interface soient moins marquées que les écarts constatés sur le potentiel ou le champ de vitesse.

L'algorithme de raffinement de la triangulation développé au chapitre 3 a été utilisé pour la résolution numérique du problème MHDTE, afin de raffiner le maillage au voisinage du front de solidification. Les résultats numériques montrent que l'adaptation locale du maillage à la position du front de solidification modifie peu la solution stationnaire du modèle MHDTE, hormis dans les coins de la cuve. En effet, l'écart entre les solutions stationnaires obtenues avec raffinement et sans raffinement du maillage sont de l'ordre de 2% à 3%. Néanmoins, en termes de temps de calculs, raffiner au voisinage du front de solidification permet de gagner un peu de temps CPU. En effet, le temps pris pour la résolution des équations de Navier-Stokes est diminué lorsqu'il y a raffinement du maillage, car nous résolvons celles-ci uniquement sur le domaine liquide, qui contient moins de nœuds que le domaine Ω . En conclusion, nous recommandons l'usage de la méthode du paragraphe 6.4.2, car cette dernière est plus précise dans les coins.

Dans le cadre de ce travail, nous avons également introduit une cuve d'électrolyse simplifiée, appelée *cuve numérique thermique*, qui permet de s'approcher du comportement thermoélectrique d'une cuve industrielle. Cette nouvelle géométrie permet de tenir compte du creuset contenant les fluides, ainsi que de la croûte. L'usage de cette cuve permet de tester les méthodes numériques utilisées pour la résolution numérique du problème MHDTE sur un cas réaliste, et avec un temps de calcul moindre que sur une cuve industrielle.

Dans tous les résultats présentés dans ce travail, le champ d'induction \vec{B} est indépendant du processus de solidification. La répartition du courant étant fortement modifiée par la formes des zones solides, il serait intéressant de recalculer le champ d'induction \vec{B} avec la densité de courant obtenue lorsque les zones solides sont prises en compte. Cette modification du champ d'induction pourrait alors changer l'interface bain-métal stationnaire lorsque cette dernière est calculée lorsqu'il y a présence de talus.

Le modèle de turbulence thermique utilisé dans nos travaux est un modèle simple de longueur de mélange, tout comme le modèle de viscosité turbulente utilisé dans les équations de Navier-Stokes. L'utilisation de modèles plus complexes, tenant compte de la distance à la paroi ou de la distance au bord des talus, permettrait de gagner en précision sur l'écoulement des fluides sur le bord du domaine, ainsi que sur la diffusion thermique au voisinage des talus. Une étude de différents modèles de viscosité turbulente et de conductivité thermique turbulente est en cours.

Bibliographie

- [1] ARNOLD, D., BREZZI, F., AND FORTIN, M. A stable finite element for the stokes equations. *Calcolo* 21 (1984), 337 – 344.
- [2] BABUSKA, I., AND OSBORN, J. Eigenvalue problems. vol. 2 of *Handbook of Numerical Analysis*. Elsevier, 1991, pp. 641–787.
- [3] BARRETT, J. W., AND ELLIOTT, C. M. Fitted and unfitted finite-element methods for elliptic equations with smooth interfaces. *IMA Journal of Numerical Analysis* 7, 3 (1987), 283–300.
- [4] BELYTSCHKO, T., MOËS, N., USUI, S., AND PARIMI, C. Arbitrary discontinuities in finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 50, 4 (2001), 993–1013.
- [5] BERGER, A. E., BREZIS, H., AND ROGERS, J. C. W. A numerical method for solving the problem $u_t - \delta f(u) = 0$. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique* 13, 4 (1979), 297–312.
- [6] BROOKS, A. N., AND HUGHES, T. J. Streamline upwind/ Petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 32, 1–3 (1982), 199 – 259.
- [7] CABOUSSAT, A., CLAUSEN, P., AND RAPPAZ, J. Numerical simulation of two-phase flow with interface tracking by adaptive eulerian grid subdivision. *Mathematical and Computer Modelling* 55, 3–4 (2012), 490 – 504.
- [8] CHEN, T., MINEV, P. D., AND NANDAKUMAR, K. A projection scheme for incompressible multiphase flow using adaptive eulerian grid. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 45, 1 (2004), 1–19.
- [9] CHEMA, J., AND BELYTSCHKO, T. An extended finite element method for two-phase fluids. *Journal of Applied Mechanics* 70, 1 (2003), 10–17.
- [10] CHEMA, J., SMOLINSKI, P., AND BELYTSCHKO, T. The extended finite element method (xfem) for solidification problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 53, 8 (2002), 1959–1977.
- [11] CODINA, R., HOUZEAUX, G., COPPOLA-OWEN, H., AND BAIGES, J. The fixed-mesh ale approach for the numerical approximation of flows in moving domains. *Journal of Computational Physics* 228, 5 (2009), 1591–1611.

- [12] COPPOLA-OWEN, A. H., AND CODINA, R. Improving eulerian two-phase flow finite element approximation with discontinuous gradient pressure shape functions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 49, 12 (2005), 1287–1304.
- [13] COUSTEIX, J. *Aérodynamique : turbulence et couche limite*. Collection La Chevêche, ISSN 0990-364X. Cépaduès-éd., Toulouse, 1989.
- [14] DANTZIG, J., AND RAPPAZ, M. *Solidification*. Engineering sciences. Materials. EPFL Press, 2009.
- [15] DAUTRAY, R., AND LIONS, J.-L. Chap xviii. evolution problems : Variational methods. vol. 5 of *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*. Springer-Verlag, Heidelberg, 2000, pp. 467–680.
- [16] DESCLOUX, J., FLUECK, M., AND ROMERIO, M. V. Spectral aspects of an industrial problem. In *Spectral analysis of complex structures (Paris, 1993)*, vol. 49 of *Travaux en Cours*. Hermann, Paris, 1995, pp. 17–33.
- [17] DESCLOUX, J., FLUECK, M., AND ROMERIO, M. V. A modelling of the stability of aluminium electrolysis cells. In *Nonlinear partial differential equations and their applications. Collège de France Seminar, Vol. XIII (Paris, 1994/1996)*, vol. 391 of *Pitman Res. Notes Math. Ser.* Longman, Harlow, 1998, pp. 117–133.
- [18] ERN, A., AND GUERMOND, J.-L. *Theory and Practice of Finite Elements*. Springer, 2004.
- [19] FLÜCK, M., HOFER, T., JANKA, A., AND RAPPAZ, J. Numerical methods for ferromagnetic plates. *Scientific Report in Analysis and Numerical Analysis*, EPFL, 2008.
- [20] FLOTTRON, S., AND RAPPAZ, J. *Conservation Schemes for convection-diffusion equations with Robin boundary conditions*. Article submitted, 2012.
- [21] FRANCA, L. P., FREY, S. L., AND HUGHES, T. J. Stabilized finite element methods : I. application to the advective-diffusive model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 95, 2 (1992), 253 – 276.
- [22] GALLAIRE, F. Communication personnelle, 2012.
- [23] GERBEAU, J., BRIS, C. L., AND LELIEVRE, T. *Mathematical Methods for the Magnetohydrodynamics of Liquid Metals*. Oxford University Press, 2006.
- [24] GIRAULT, V., AND RAVIART, P. *Finite element methods for Navier-Stokes equations : theory and algorithms*. Springer series in computational mathematics. Springer-Verlag, 1986.
- [25] GRJOTHEIM, K. *Aluminium electrolysis : the chemistry of the Hall-Heroult process / K. Grjotheim ... [et al.]*. Aluminium-Verlag, Dusseldorf :, 1977.
- [26] GROÍ, S., AND REUSKEN, A. An extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows with surface tension. *J. Comput. Phys.* 224, 1 (May 2007), 40–58.
- [27] HIRT, C., AND NICHOLS, B. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics* 39, 1 (1981), 201 – 225.
- [28] HOFER, T. *Numerical Simulation and Optimization of the Alumina Distribution in an Aluminium Electrolysis Pot*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2011. Thèse EPFL n° 5023.

-
- [29] JOUVET, G. *Modélisation, analyse mathématique et simulation numérique de la dynamique des glaciers*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2010. Thèse EPFL n° 4677.
- [30] KIM, J., AND LOWENGRUB, J. Interfaces and multicomponent fluids. In *Encyclopedia of Mathematical Physics*, E. in Chief : Jean-Pierre Francoise, G. L. Naber, , and T. S. Tsun, Eds. Academic Press, Oxford, 2006, pp. 135 – 144.
- [31] LAMB, H. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, 1932.
- [32] LOCK, N., JAEGER, M., MEDALE, M., AND OCCELLI, R. Local mesh adaptation technique for front tracking problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 28, 4 (1998), 719–736.
- [33] MAGENES, E., NOCHETTO, R., AND VERDI, C. Energy error-estimates for a linear scheme to approximate nonlinear parabolic problems. *RAIRO. Mathematical modelling and numerical analysis* 21, 4 (1987), 655 – 678.
- [34] MÉDALE, M., AND JAEGER, M. Modélisation par éléments finis d'écoulements à surface libre avec changement de phase solide-liquide. *International Journal of Thermal Sciences* 38, 3 (1999), 267 – 276.
- [35] MOHAMMADI, B., AND PIRONNEAU, O. *Analysis of the $k - \varepsilon$ turbulence model*. RAM : Research in Applied Mathematics. Masson, Paris, 1994.
- [36] MUNGER, D. *Stabilité magnétohydrodynamique des cuves d'électrolyse : aspects physiques et idées nouvelles*. PhD thesis, Université de Montréal, 2008.
- [37] NAGRATH, S., JANSEN, K. E., AND JR., R. T. L. Computation of incompressible bubble dynamics with a stabilized finite element level set method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194, 42–44 (2005), 4565 – 4587.
- [38] NOCHETTO, R. H., AND VERDI, C. An efficient linear scheme to approximate parabolic free boundary problems : Error estimates and implementation. *Mathematics of Computation* 51, 183 (1988), pp. 27–53.
- [39] OSHER, S., AND SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics* 79, 1 (1988), 12 – 49.
- [40] OSHER, S. J., AND FEDKIW, R. P. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, 1 ed. Springer, Oct. 2002.
- [41] PAIN, S. *Simulation numérique du mouvement des fluides dans une cellule de Hall-Héroult*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2006. Thèse EPFL n° 3497.
- [42] PEDCHENKO, A., MOLOKOV, S., PRIEDE, J., LUKYANOV, A., AND THOMAS, P. J. Experimental model of the interfacial instability in aluminium reduction cells. *EPL (Europhysics Letters)* 88, 2 (2009), 24001.
- [43] POPE, S. B. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [44] QUARTERONI, A., AND VALLI, A. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, Heidelberg, DE, 1994.
-

- [45] RAPPAZ, J. Communication personnelle, 2011.
- [46] RAPPAZ, M., BELLET, M., AND DEVILLE, M. *Numerical Modeling in Materials Science and Engineering*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, 2003.
- [47] REUSKEN, A. Analysis of an extended pressure finite element space for two-phase incompressible flows. *Comput. Vis. Sci.* 11, 4-6 (July 2008), 293–305.
- [48] SAFA, Y. *Simulation numérique des phénomènes thermiques et magnétohydrodynamiques dans une cellule de Hall-Héroult*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2005. Thèse EPFL n° 3185.
- [49] SELE, T. Instabilities of the metal surface in electrolytic alumina reduction cells. *Metallurgical Transactions B* 8 (1977), 613–618.
- [50] SETHIAN, J. A. *Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science ... on Applied and Computational Mathematics*, 2 ed. Cambridge University Press, June 1999.
- [51] STEINER, G. *Simulation numérique de phénomènes MHD : application à l'électrolyse de l'aluminium*. PhD thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2009. Thèse EPFL n° 4469.
- [52] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., AND OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics* 114, 1 (1994), 146 – 159.
- [53] TRYGGVASON, G., SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. Cambridge University Press, 2011.

Curriculum Vitae

Né le 13 novembre 1985 à Vevey (VD), j'entre en 2001 au gymnase du Bugnon à Lausanne en option physique et application des mathématiques, où j'obtiens ma maturité fédérale en juin 2004. En septembre de la même année, j'entame des études de mathématiques à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, où j'obtiens mon Bachelor en 2007, suivi d'un master en ingénierie mathématique en 2009. Suite à mon projet de diplôme avec le Prof. Jacques Rappaz, je décide de poursuivre mes études en effectuant mon travail de thèse dans son groupe. C'est ainsi que depuis avril 2009, je suis assistant dans son groupe et travaille à la simulation numérique du procédé de Hall-Héroult.